

## SIMULACIÓN POR CFD DEL TRANSPORTE Y TRANSFORMACIÓN QUÍMICA DE CONTAMINANTES EN ENTORNOS URBANOS

### CFD SIMULATION OF TRANSPORT AND CHEMICAL TRANSFORMATION OF POLLUTANTS IN URBAN ENVIRONMENTS

Melisa I. Mendoza, Santiago F. Corzo y Damian E. Ramajo

*Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC CONICET-UNL), Predio CONICET Santa Fe "Dr. Alberto Cassano", Colectora Ruta Nac. Nro. 168 s/n, Paraje El Pozo, 3000 Santa Fe, mendozamelisaileana@gmail.com*

**Palabras clave:** contaminantes atmosféricos, callejón urbano, fotoestacionario, *reactingFoam*.

**Resumen.** La caracterización de la dispersión y reactividad química de contaminantes en ambientes urbanos requiere herramientas de simulación que integren la fluidodinámica atmosférica, la geometría urbana y los procesos químicos asociados. Este trabajo aborda el análisis del transporte y transformación química de especies contaminantes emitidas por vehículos en un entorno urbano, empleando el solver *reactingFoam* de OpenFOAM®. Este enfoque numérico permite abordar configuraciones donde el transporte y la cinética química están fuertemente acoplados, particularmente en reacciones fotoquímicas inducidas por radiación solar y en la formación de contaminantes secundarios. El caso de estudio se basa en un dominio tipo "street canyon" o callejón urbano, bajo condiciones fotoestacionarias, lo cual representa una configuración típica de entorno urbano. En este escenario se analiza la distribución espacio-temporal de especies clave como óxidos de nitrógeno (NO y NO<sub>2</sub>) y ozono (O<sub>3</sub>), evaluando la capacidad del modelo para reproducir tanto los patrones de flujo como la evolución química de los contaminantes. Los resultados muestran que el modelo numérico representa adecuadamente el acoplamiento entre el transporte convectivo-difusivo y las reacciones químicas, habilitando su aplicación al estudio de calidad de aire en entornos urbanos más complejos.

**Keywords:** atmospheric pollutants, urban street canyon, photostationary state, *reactingFoam*.

**Abstract.** The characterization of the dispersion and chemical reactivity of pollutants in urban environments requires simulation tools that integrate atmospheric fluid dynamics, urban geometry, and the associated chemical processes. This work addresses the analysis of the transport and chemical transformation of pollutant species emitted by vehicles in an urban setting, employing the *reactingFoam* solver from OpenFOAM®. This numerical approach allows for the treatment of configurations where transport and chemical kinetics are strongly coupled, particularly in photochemical reactions induced by solar radiation and in the formation of secondary pollutants.

The case study is based on a *street canyon*-type domain under photostationary conditions, representing a typical urban environment configuration. In this scenario, the spatiotemporal distribution of key species such as nitrogen oxides (NO y NO<sub>2</sub>) and ozone (O<sub>3</sub>) is analyzed, evaluating the model's ability to reproduce both the flow patterns and the chemical evolution of pollutants. The results show that the numerical model adequately represents the coupling between convective-diffusive transport and chemical reactions, enabling its application to air quality studies in more complex urban environments.

## 1. INTRODUCCIÓN

La calidad del aire en entornos urbanos constituye un desafío creciente, tanto por su impacto en la salud pública como por la complejidad de los procesos físico-químicos que la determinan. En ciudades con alta densidad vehicular, los óxidos de nitrógeno y el ozono troposférico se encuentran entre los contaminantes atmosféricos de mayor preocupación. La distribución y transformación de estos compuestos está determinada por una interacción dinámica entre las emisiones directas, el transporte turbulento y las reacciones fotoquímicas que tienen lugar en la atmósfera.

Los óxidos de nitrógeno (NO y NO<sub>2</sub>) cumplen un papel central en la química atmosférica urbana. El monóxido de nitrógeno (NO) se emite principalmente por procesos de combustión, mientras que el dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>) puede originarse por oxidación de NO o por emisión directa. Este último presenta mayor riesgo sanitario, ya que es un gas irritante que penetra en las vías respiratorias, actuando tanto como contaminante primario como precursor de partículas finas y ozono. Su inhalación se asocia con disminución de la función pulmonar, exacerbación de enfermedades respiratorias, incremento de hospitalizaciones y aumento de la mortalidad por causas cardiovasculares y respiratorias [COMEAP \(2018\)](#); [World Health Organization \(2021\)](#).

El ozono troposférico (O<sub>3</sub>), potente agente oxidante secundario, induce respuestas inflamatorias en las vías respiratorias, incrementa la reactividad bronquial y agrava condiciones preexistentes como el asma [World Health Organization \(2021\)](#); [Pope III et al. \(2002\)](#). Estos impactos son más severos en poblaciones vulnerables, lo que resalta la importancia de monitorear y modelar la distribución espacio-temporal de estos contaminantes para disponer de herramientas que nos permitan diseñar estrategias de control eficaces.

En este contexto, la Resolución N° 0201/2004 de la provincia de Santa Fe de la [Secretaría de Estado de Medio Ambiente y Desarrollo Sustentable \(2004\)](#) establece Niveles Guía de Calidad de Aire para distintos contaminantes, con el fin de proteger la salud y el ambiente. Para el dióxido de nitrógeno, se fijan valores guía de 0,40 mg/m<sup>3</sup> (20 minutos) y 0,10 mg/m<sup>3</sup> (24 horas), mientras que para el ozono troposférico se establece un valor de referencia de 0,235 mg/m<sup>3</sup> para promedios horarios. Estos umbrales de contaminantes criterio permiten evaluar el riesgo sanitario asociado a la presencia de contaminantes en áreas urbanas.

La distribución de contaminantes en ciudades está fuertemente condicionada por la geometría urbana. En particular, los denominados *callejones* o *street canyons* (Figura 1) generan vórtices recirculantes que reducen la ventilación y favorecen la acumulación de contaminantes. Un parámetro clave en su caracterización es la relación entre el ancho de la calle ( $W$ ) y la altura de los edificios ( $H$ ), conocida como *relación de aspecto* ( $W/H$ ) [Oke \(1988\)](#); [Meroney et al. \(1996\)](#).

[Oke \(1988\)](#) identificó tres regímenes de flujo en callejones según la relación  $H/W$ : flujo de rugosidad aislada (isolated roughness flow), flujo por interferencia de estelas (wake interference flow) y flujo de deslizamiento (skimming flow). Estos regímenes, ilustrados en la Figura 2, definen transiciones críticas en la ventilación del callejón. En particular, un valor de  $H/W \approx 0,65$  marca el umbral entre una ventilación eficiente y una circulación confinada, con implicancias en la dispersión de contaminantes, la radiación solar, el microclima urbano y la exposición peatonal.

El modelado numérico acoplado de dinámica de fluidos y química atmosférica se ha consolidado como una herramienta clave para analizar estos fenómenos complejos [Sanchez et al. \(2016\)](#); [Hang et al. \(2022\)](#). Sin embargo, la implementación de mecanismos químicos detallados, como SAPRC-07 (*Statewide Air Pollution Research Center*, versión 2007) [Carter](#)

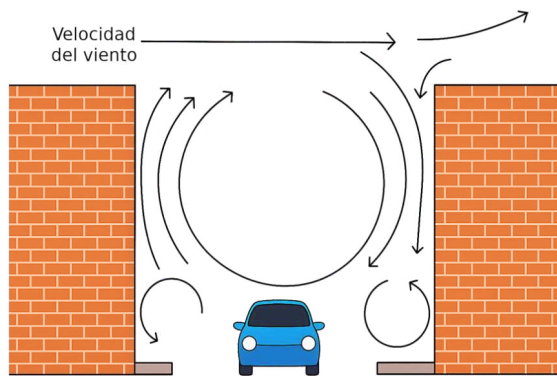


Figura 1: Esquema del régimen de flujo en un callejón urbano. El flujo de aire se desliza sobre la parte superior del callejón, sin penetrar significativamente en su interior, lo que da lugar a la formación de un vórtice principal y vórtices secundarios cerca de las esquinas.

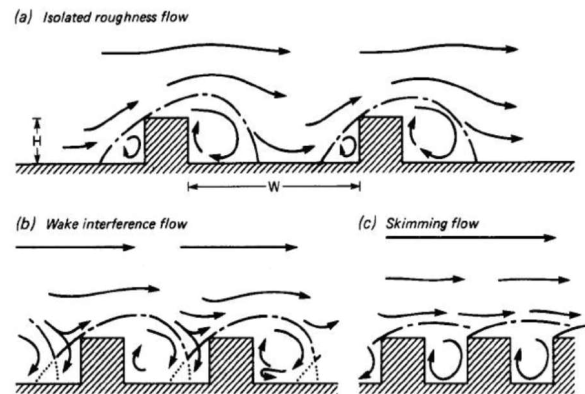
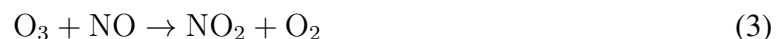
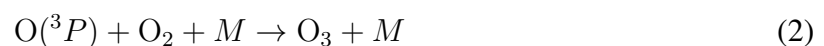


Figura 2: Regímenes de flujo asociados al flujo de aire sobre conjuntos de edificios con relación  $H/W$  creciente. Oke (1988)

(2010a,b,c), en simulaciones tridimensionales acopladas con dinámica de fluidos y en geometrías complejas implica elevados requerimientos computacionales Sanchez et al. (2016)

Por ello, en estudios a escala de callejón urbano, suelen emplearse esquemas simplificados centrados en el sistema  $\text{NO}-\text{NO}_2-\text{O}_3$ , que capturan los procesos fotoquímicos principales manteniendo un balance adecuado entre precisión y viabilidad computacional Baker et al. (2004); Baik et al. (2007); Wu et al. (2021).

El sistema  $\text{NO}-\text{NO}_2-\text{O}_3$  se describe mediante las siguientes reacciones fundamentales:



$h\nu$  representa la radiación solar incidente,  $M$  es una molécula estabilizadora (predominantemente  $\text{N}_2$  o  $\text{O}_2$ ), y  $\text{O}(^3P)$  es el oxígeno atómico en estado triplete.

Las reacciones entre  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  y  $\text{O}_3$  establecen un equilibrio dinámico conocido como *estado fotostacionario*, cuyo comportamiento depende fuertemente de las condiciones locales de ventilación, radiación y distribución de contaminantes. En callejones, la interacción entre la turbulencia y la reactividad química genera perfiles de concentración espacialmente heterogéneos, con acumulación de  $\text{NO}_2$  y disminución de  $\text{O}_3$  en zonas de recirculación, particularmente a nivel peatonal Baker et al. (2004); Baik et al. (2007); Sanchez et al. (2016).

Este trabajo tiene por objetivo analizar la distribución y transformación química del  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  y  $\text{O}_3$  en un callejón urbano utilizando el solver *reactingFoam* de OpenFOAM® versión 2412. A través de la resolución conjunta de las ecuaciones de Navier-Stokes y transporte-reacción, se busca caracterizar el acoplamiento entre flujo turbulento y química fotoestacionaria sin recurrir

a mecanismos químicos extensos, ni modificaciones al solver, aportando una herramienta eficaz para evaluar la contaminación en entornos urbanos densamente edificados.

## 2. METODOLOGÍA

### 2.1. Casos estudiados

Se plantearon dos estudios de caso con el objetivo de analizar la influencia de distintos parámetros en la distribución y transformación química de especies contaminantes en callejones empleando OpenFOAM®.

- **Test 1: Caso base.** Permite contrastar los resultados obtenidos en este trabajo con los reportados por [Sanchez et al. \(2016\)](#), analizar el efecto descontaminante de la fotólisis y estudiar la sensibilidad a la resolución de la malla.
- **Test 2: Ángulo de incidencia solar.** Analiza el efecto de la radiación solar como mecanismo descontaminante, considerando diferentes ángulos cenitales representativos de distintas condiciones horarias.

### 2.2. Modelo computacional

El presente trabajo emplea el solver *reactingFoam* de OpenFOAM® versión 2412 para simular el transporte y la reactividad química de contaminantes atmosféricos en un callejón urbano.

El solver *reactingFoam* se utiliza habitualmente para resolver problemas de combustión con reacciones químicas complejas [Yang et al. \(2019\)](#); [Borujeni y Norouzi \(2020\)](#); [Lahaye D. \(2022\)](#), aunque también ha sido aplicado en estudios de dinámica atmosférica y transporte de contaminantes [Zhong et al. \(2017\)](#); [Hang et al. \(2022\)](#).

Este solver resuelve de forma acoplada las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento, especies químicas y energía, incluyendo los términos de reacción relevantes. Las ecuaciones generales que resuelve son las siguientes:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} = -\nabla p \quad (5)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\mu_{eff} \nabla Y_i) = w_i \quad (6)$$

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} h) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla p + \bar{\bar{\tau}} : \nabla \mathbf{v} \quad (7)$$

donde  $\mathbf{v}$  es la velocidad,  $\mu_{eff}$  es la viscosidad efectiva,  $w_i$  es la velocidad de reacción másica de la especie  $i$ ,  $h$  es la entalpía específica de la mezcla, y  $\bar{\bar{\tau}}$  es el tensor de tensiones.

En particular, la ecuación de balance de  $Y_i$  incluye el efecto de la turbulencia en la difusión, mediante el término de difusión turbulenta incluido en  $\mu_{eff}$ . Este aspecto resulta especialmente relevante en el análisis de configuraciones donde no puede asumirse mezcla perfecta, o donde los reactivos están inicialmente segregados, como ocurre en los callejones.

## 2.3. Configuración de las simulaciones

Los casos de estudio se desarrollaron tomando como referencia los trabajos de [Sanchez et al. \(2016\)](#) y [Hang et al. \(2022\)](#), quienes abordaron la dinámica de contaminantes en callejones mediante simulaciones CFD.

En particular, [Sanchez et al. \(2016\)](#) emplearon el software STAR-CCM+® para simular la dispersión y reactividad de especies como NO, NO<sub>2</sub> y O<sub>3</sub>, mientras que [Wu et al. \(2021\)](#); [Hang et al. \(2022\)](#) implementaron un modelo propio en OpenFOAM® para resolver el transporte y los procesos químicos en entornos atmosféricos.

En el presente trabajo se aborda la misma problemática utilizando directamente el solver *reactingFoam*, sin realizar modificaciones sustanciales al código fuente ni implementar esquemas adicionales de cinética química. La descripción detallada de la geometría, el mallado, las condiciones iniciales y de contorno, así como los parámetros de simulación química, se presenta en las secciones siguientes.

### 2.3.1. Geometría y mallado

El dominio de simulación es un callejón urbano con dimensiones de  $24 \times 40 \times 64$  m en las direcciones  $x$ ,  $y$  y  $z$ , respectivamente. La relación de aspecto es  $H/W = 1$ , siendo la altura de los edificios  $H$  y el ancho de la calle  $W$  ambos iguales a 16 m. La altura total del dominio en la dirección vertical se extiende hasta  $4H$ .

Para la discretización espacial se generaron tres mallas bidimensionales estructuradas con refinamiento uniforme en todo el dominio, cada una con una resolución diferente, tal como se presenta en la Tabla 1

| Malla | Cantidad de celdas | Tamaño promedio de celdas (mm) |
|-------|--------------------|--------------------------------|
| M1    | 1408               | 1000                           |
| M2    | 32500              | 160                            |
| M3    | 40000              | 80                             |

Tabla 1: Características de las mallas empleadas.

El uso de mallas estructuradas garantiza un control riguroso sobre la calidad y uniformidad del mallado, lo que facilita la convergencia numérica y mejora la precisión en la resolución de los gradientes del flujo y de las especies reactivas.

### 2.3.2. Condiciones iniciales y de contorno

Las condiciones de simulación bidimensional adoptadas en este trabajo se basan en lo reportado por [Sanchez et al. \(2016\)](#). Las concentraciones iniciales de las especies consideradas en el dominio fueron de 16 ppb para NO, 35 ppb para NO<sub>2</sub>, 38.9 ppb para O<sub>3</sub>, 200 ppb para CO<sub>2</sub> y 2 ppb para SO<sub>2</sub>. La temperatura se fijó en 293 K y la presión en 1 atm.

En los contornos de entrada y salida del dominio se aplicaron condiciones periódicas (cíclicas), con una velocidad del viento establecida en 1.9 m/s. Las emisiones de NO<sub>x</sub> en el interior del callejón se implementó mediante una fuente volumétrica, asociada a un conjunto de celdas definidas a lo ancho de la calle y desde el piso hasta la altura de la primera celda de la malla empleada.

Se empleó el modelo de turbulencia estándar  $k-\varepsilon$ , con un paso temporal ( $\Delta t$ ) de 0.1 s. Se asumieron condiciones de simetría en la dirección transversal ( $y$ ), y condiciones periódicas en la dirección longitudinal ( $x$ ), con el objetivo de representar un arreglo infinito de callejones.

El flujo se impulsó en la dirección  $x$  mediante la aplicación de un gradiente de presión constante, lo que asegura una configuración representativa del régimen de viento urbano. De este modo, se obtuvo una velocidad de referencia de 0,23 m/s, en concordancia con lo reportado por [Sanchez et al. \(2016\)](#).

En la parte superior del dominio se impusieron condiciones de simetría para las ecuaciones de flujo y turbulencia, lo cual implica un flujo paralelo al plano superior y gradientes nulos para las variables dinámicas.

Inicialmente, se realizó una simulación de 60 minutos de la fluidodinámica para permitir el desarrollo del perfil cíclico y la formación del vórtice en el callejón, utilizando las condiciones iniciales y de contorno previamente descriptas. Posteriormente, se activaron durante 30 minutos las emisiones gaseosas de  $\text{NO}_x$  y las ecuaciones químicas que rigen el proceso estudiado, acoplando de este modo la fluidodinámica con la química.

### 2.3.3. Parámetros de simulación química

En este trabajo se adoptó el esquema en estado fotoestacionario, empleando constantes de fotólisis ( $k_{ph}$ ) que varían en función del ángulo cenital ( $\theta$ ), es decir, el ángulo que forma la dirección de la radiación solar con la vertical local, aplicado a la reacción representada en la Ec. (1). Las constantes de fotólisis se obtuvieron del mecanismo SAPRC-07 [Carter \(2010a\)](#), específicamente del conjunto *Phot Set* =  $\text{NO}_2$ -06, derivado de la base de datos de la NASA (2006) para una temperatura de 294 K.

Las constantes cinéticas  $k$  utilizadas en las Ecs. (2) y (3) se determinaron a partir de la expresión de Arrhenius:

$$k = Ae^{\frac{-E_a}{RT}} \quad (8)$$

donde  $A$  es el factor preexponencial,  $E_a$  la energía de activación,  $R$  la constante de los gases ideales y  $T$  la temperatura en kelvin. Para la Ec. (2), se utilizó un valor de  $A = 1,80 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molec}\cdot\text{s}$  y  $E_a/R = -70 \text{ K}$ , mientras que para la Ec. (3) se consideró  $A = 2,00 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/\text{molec}\cdot\text{s}$  y  $E_a/R = 1400 \text{ K}$ , siguiendo lo reportado por [Sanchez et al. \(2016\)](#).

Finalmente, la base de datos termodinámica requerida por el solver se construyó utilizando la información reportada por [Wu et al. \(2021\)](#), incorporando las propiedades específicas de cada especie química relevante para el sistema.

## 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A continuación se presentan los resultados obtenidos para la simulaciones realizadas.

### 3.1. Test 1: Caso base

Se contrastan los resultados obtenidos mediante el empleo del solver *reactingFoam* de OpenFOAM® con los reportados por [Sanchez et al. \(2016\)](#), luego de 30 minutos de activada las emisiones de gases de combustión y la química fotoestacionaria para un ángulo cenital de  $\theta = 40^\circ$  siendo  $k_{ph} = 0,631 \text{ min}^{-1}$  ([Carter \(2010a\)](#)) y la tasa de emisión de NO y  $\text{NO}_2$  fue de 112 y 17  $\mu\text{g}/\text{m} \cdot \text{s}$  respectivamente equivalentes a un tráfico vehicular medio ([Baker et al. \(2004\)](#)).



Las concentraciones de NO y NO<sub>2</sub> fueron normalizadas utilizando la expresión propuesta por Meroney et al. (1996), que se presenta a continuación:

$$[NO_x]_N = \frac{C U_{\text{ref}} H L}{Q} \quad (9)$$

En esta ecuación,  $C$  representa la concentración real en ppb,  $U_{\text{ref}}$  es la velocidad de referencia en m/s (adoptándose un valor de 0,23 m/s, según Sanchez et al. (2016)),  $H$  corresponde a la altura del edificio en metros,  $L$  a la longitud de la fuente en metros, y  $Q$  al caudal de emisión de la fuente en m<sup>3</sup>/s.

De acuerdo con lo reportado por Secretaría de Estado de Medio Ambiente y Desarrollo Sustentable (2004), los valores límite normalizados para NO<sub>2</sub> son de 81,51 ppb para una exposición de 20 minutos, y de 20,38 ppb para 24hs.

Inicialmente, se lleva a cabo un análisis de convergencia de malla, para lo cual se comparan los resultados obtenidos con diferentes niveles de refinamiento. En la Figura 3 se presenta la distribución de la velocidad en el interior del callejón donde se observa la formación de un vórtice en el callejón generado por la disposición de los edificios (representados de manera ilustrativa).

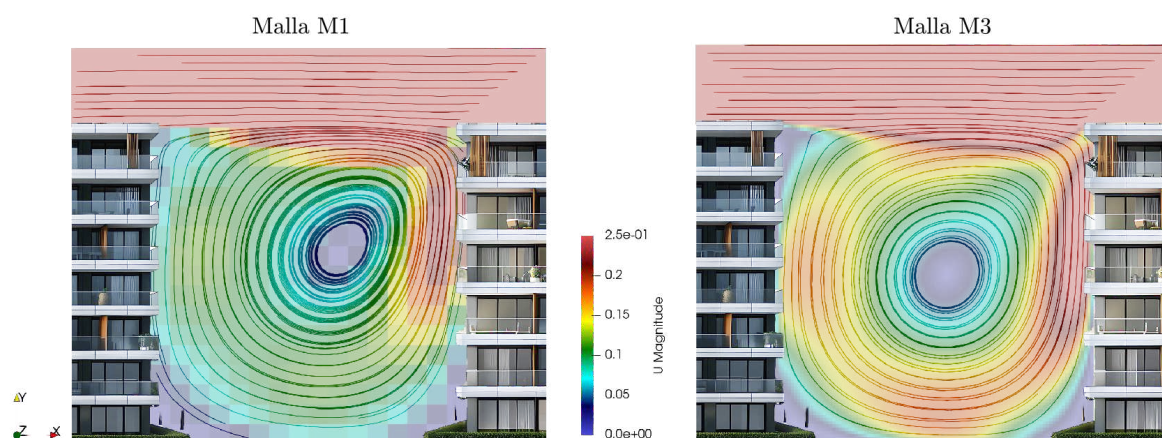


Figura 3: Distribución de la velocidad a los 30 minutos de iniciada la reacción química de los compuestos presentes en la atmósfera.

Como se evidencia en la Figura 3 la simulación con la malla gruesa (M1), el vórtice en el callejón se encuentra claramente definido, aunque la representación de los gradientes de velocidad muestra transiciones más abruptas debido al menor número de celdas. En la malla fina (M3), el mismo vórtice se observa con mayor nivel de detalle. El refinamiento de la discretización permite capturar variaciones más suaves y continuas en el campo de velocidades, aportando una descripción más precisa de la dinámica del flujo atmosférico entre los edificios ilustrativos.

A su vez, en la Figura 4 muestra los perfiles de concentración resultantes, lo que permite evaluar la sensibilidad de la solución respecto a la discretización espacial.

Se observa que la malla M1 (línea de trazo magenta) presenta mayores discrepancias con los datos de referencia, especialmente en el rango de altura comprendido entre  $z/H = 0,5$  y  $z/H = 1,2$ , lo que indica que su resolución es insuficiente para capturar con precisión los gradientes de concentración. La malla M2 (línea de trazo naranja) muestra una mejora sustancial en el ajuste, acercándose a los valores reportados por Sanchez et al. (2016). Finalmente, la malla

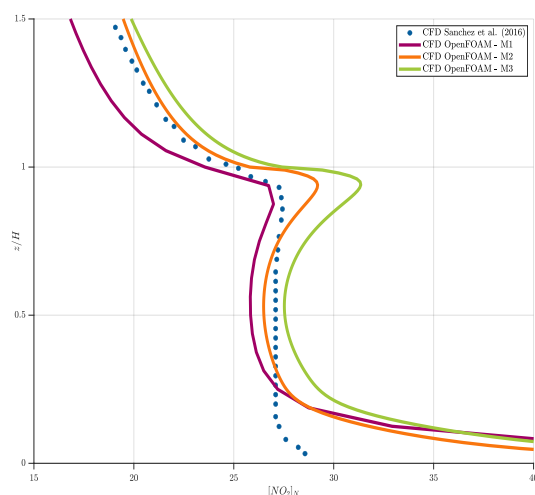


Figura 4: Perfiles verticales del promedio espacial horizontal de  $[NO_2]_N$ . Analisis CDF de convergencia de malla.

M3 (línea de trazo verde) exhibe un perfil muy similar al de M2, con diferencias mínimas a lo largo de todo el dominio.

Esta tendencia evidencia que se ha alcanzado la convergencia de malla, dado que el refinamiento adicional de M3 respecto de M2 no genera cambios significativos en los resultados. En efecto, los tiempos de simulación para cada malla fueron de 239 s para M1, 3050 s para M2 y 3164 s para M3, lo que refuerza la elección de M2 como opción óptima. En consecuencia, se considera que la malla M2 es adecuada para las simulaciones, al lograr un buen equilibrio entre precisión numérica y costo computacional.

Por lo tanto, la malla M2 es la empleada en adelante. A continuación, en las Figuras 5 y 6, se presentan los resultados obtenidos para la distribución y transformación de los  $NO_x$  en el callejón.

En la Figura 5, los resultados simulados capturan correctamente el incremento de  $NO_2$  hacia capas más altas, producto de la reacción fotoquímica entre  $NO$  y  $O_3$ . Aunque resulta notoria la mayor concentración obtenida en el piso del callejón, la forma general se mantiene coherente con los resultados de Sanchez et al. (2016).

Por otro lado, en la Figura 6, las diferencias principalmente se observan en el piso del callejón, donde el modelo de OpenFOAM® muestra una mayor acumulación respecto de los datos de referencia. Cabe destacar que la concentración obtenida para ambos compuestos químicos se ajusta con un perfil de flujo más desarrollado dentro del callejón.

Para el presente trabajo es de interés cuantificar el impacto de la química fotoestacionaria en la simulación de contaminantes atmosféricos. Por ello, se realizó un análisis comparativo aplicando tres escenarios al callejón estudiado, todos con un período de emisión de ( $NO_x$ ) de 30 minutos, considerando en un escenario sólo emisión sin reacciones químicas, en otro la emisión con reacciones entre  $NO$  y  $O_3$  sin considerar fotólisis, y en el tercero la emisión con química fotoestacionaria, que incluye la fotólisis del  $NO_2$ . Los resultados se comparan en la Figura 7, junto con datos de referencia de Sanchez et al. (2016).

Para el escenario sin reacciones químicas (línea de trazo rosado), el  $NO_2$  se comporta únicamente como contaminante primario. Las concentraciones resultantes son considerablemente más bajas y siguen fielmente el patrón de dispersión impuesto por el flujo de aire.



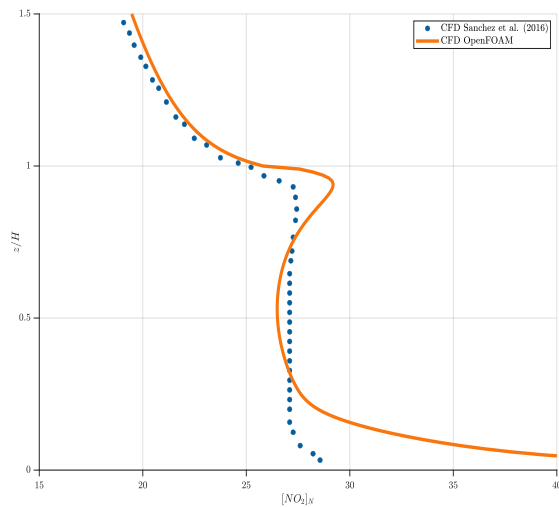


Figura 5: Perfiles verticales del promedio espacial horizontal de  $[NO_2]_N$ . CFD Sanchez et al. (2016) y CFD *reactingFoam* para  $t=90\text{min}$  (60min iniciales + 30min química)

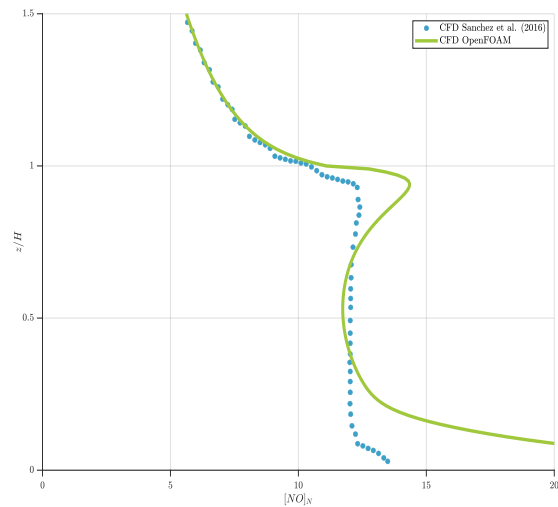


Figura 6: Perfiles verticales del promedio espacial horizontal de  $[NO]_N$ . CFD Sanchez et al. (2016) y CFD *reactingFoam* para  $t=90\text{min}$  (60min iniciales + 30min química)

Si se acumulara la cantidad de  $NO_2$  emitido en el callejón durante 30 minutos, se obtendría un valor de  $0,12 \text{ mg/m}^3$ . Al sumar el aporte de fondo presente en el aire, de  $0,043 \text{ mg/m}^3$ , se alcanza un total de  $0,163 \text{ mg/m}^3$  de dióxido de nitrógeno. Este resultado supera el umbral establecido para exposiciones de 24 horas, pero permanece por debajo del límite permitido para exposiciones de 20 minutos, que es de  $0,40 \text{ mg/m}^3$ , según [Secretaría de Estado de Medio Ambiente y Desarrollo Sustentable \(2004\)](#).

El segundo escenario presenta reacciones químicas sin fotólisis (línea de trazo violeta), es decir se incluye la reacción entre el  $NO$  emitido y el  $O_3$  disponible en la atmósfera, lo que da lugar a la formación secundaria de  $NO_2$ , según la Ec.(3). Este proceso aumenta significativamente las concentraciones de  $NO_2$  respecto al primer escenario. Sin embargo, al no contemplarse la fotólisis, no se produce regeneración de  $NO$  ni oxígeno atómico, por lo que el ciclo químico permanece incompleto y se acumula mayor cantidad de  $NO_2$ .

Por último, el escenario con reacciones fotoquímicas en estado estacionario (línea de trazo naranja) considera, además de la reacción entre  $NO$  y  $O_3$ , la fotólisis del  $NO_2$  (Ec. 1) y la formación de ozono (Ec. 2), cerrando así el ciclo fotoquímico. Este ciclo dinámico permite una transformación continua entre  $NO$  y  $NO_2$ , lo que modera su acumulación y genera una distribución más representativa de ambas especies.

Se comparan los valores obtenidos con los establecidos en la normativa vigente de la Provincia de Santa Fe: los valores límite normalizados para  $NO_2$  son de 81,51 ppb para una exposición de 20 minutos y de 20,38 ppb para 24 horas. Por lo tanto, se considera admisible una exposición de 20 minutos, pero no así una de 24 horas.

### 3.2. Test 2: Ángulo de incidencia solar

Es de interés analizar el efecto de la variación del ángulo cenital de incidencia de la radiación solar sobre el perfil de concentración de  $NO_2$ . Para ello, se consideran tres valores de dicho ángulo. Los coeficientes de fotólisis  $k_{ph}$  adoptados son los siguientes: para un ángulo  $\theta = 0^\circ$ ,

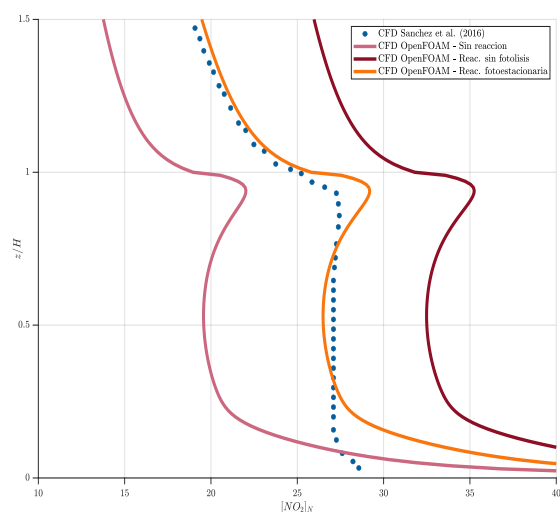


Figura 7: Perfiles verticales del promedio espacial horizontal de  $[NO_2]_N$  para tres escenarios: sin considerar reacción, con reacción sin fotólisis y con la reacción completa.

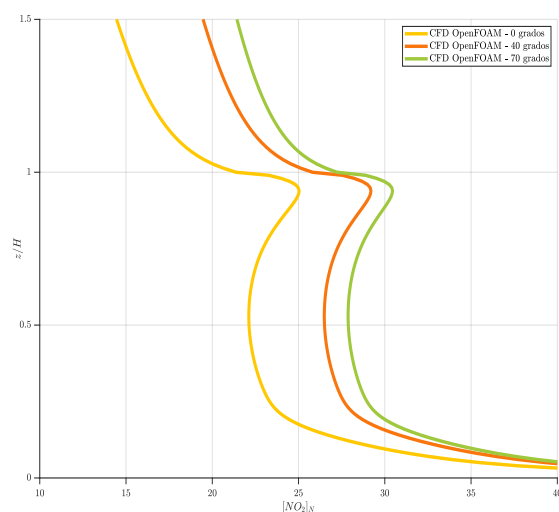


Figura 8: Perfiles verticales del promedio espacial horizontal de  $[NO_2]_N$  para tres ángulos cenitales de incidencia solar ( $0^\circ$ ,  $40^\circ$  y  $70^\circ$ ), obtenidos mediante simulaciones CFD con OpenFOAM.

se utiliza  $k_{ph} = 0,7226 \text{ min}^{-1}$ ; para el caso base, con  $\theta = 40^\circ$ , se considera  $k_{ph} = 0,631 \text{ min}^{-1}$ ; y para un ángulo más inclinado de  $\theta = 70^\circ$ , se emplea  $k_{ph} = 0,253 \text{ min}^{-1}$ .

Este estudio se realiza utilizando la malla M2, manteniendo el resto de las condiciones de simulación descritas inicialmente en el caso base. Los resultados se presentan en la Figura 8.

Se observa que para  $\theta = 0^\circ$ , correspondiente a condiciones de mayor irradiancia solar, se obtiene la menor concentración de  $NO_2$  a lo largo del perfil. Esto indica una mayor eficiencia en la fotólisis del  $NO_2$ , favoreciendo su transformación y reduciendo la acumulación de  $NO_2$  en la base del callejón. En contraste, para  $\theta = 70^\circ$ , cuando la radiación solar es menos intensa, se registra una mayor concentración de  $NO_2$ , especialmente en la zona media del dominio, como resultado de una menor tasa de conversión por fotólisis. El caso intermedio, con  $\theta = 40^\circ$ , presenta un perfil también intermedio en cuanto a magnitud y forma.

Estos resultados permiten concluir que el ángulo cenital solar tiene un efecto significativo sobre la distribución de  $NO_2$  en el callejón urbano, modulando la dinámica química del sistema. A medida que disminuye la radiación incidente (mayor  $\theta$ ), la formación de  $NO_2$  se ve favorecida por la menor tasa de fotólisis, lo cual se refleja en un aumento en sus concentraciones.

#### 4. CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos con *reactingFoam*, empleando una química fotoestacionaria simplificada y un ángulo cenital de  $\theta = 40^\circ$ , permiten reproducir de manera satisfactoria la distribución vertical de contaminantes primarios y secundarios en un entorno urbano bidimensional, mostrando que los perfiles verticales de concentración de  $NO_2$  y  $NO$  presentan una muy buena concordancia en la región de flujo libre, ubicada por encima del callejón, en comparación con el CFD de referencia.

Las simulaciones realizadas en el presente trabajo subrayan la necesidad de integrar tanto los procesos físicos como los químicos para alcanzar simulaciones más realistas del comportamien-

to de los contaminantes atmosféricos en áreas urbanas. Asimismo, se evidencia la relevancia de incorporar el ángulo de incidencia solar al momento de evaluar el efecto descontaminante de la radiación solar directa.

Finalmente, se resalta la importancia de continuar avanzando en esta línea de investigación con el fin de desarrollar herramientas computacionales cada vez más precisas, capaces de representar fielmente la realidad urbana y de servir como insumo para la toma de decisiones en materia de políticas ambientales, ordenamiento territorial y gestión de la contaminación atmosférica.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al CONICET (PIP 11220210100709CO) y a la Universidad Nacional del Litoral (CAID 85520240141LI).

## REFERENCIAS

- Baik J.J., Kang Y.S., y Kim J.J. Modeling reactive pollutant dispersion in an urban street canyon. *Atmospheric Environment*, 41(5):934–949, 2007.
- Baker J., Walker H.L., y Cai X. A study of the dispersion and transport of reactive pollutants in and above street canyons—a large eddy simulation. *Atmospheric Environment*, 38(39):6883–6892, 2004.
- Borujeni M. y Norouzi H. How to simulate combustion of a flame using openfoam. Informe Técnico, Center of Engineering and Multiscale Modeling of Fluid flow (CEMF), 2020.
- Carter W. Development of a condensed saprc-07 chemical mechanism. *Atmospheric Environment*, 44:5336–5345, 2010a. <http://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.01.024>.
- Carter W. Development of the saprc-07 chemical mechanism. *Atmospheric Environment*, 44:5324–5335, 2010b. <http://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.01.026>.
- Carter W. Development of the saprc-07 chemical mechanism and updated ozone reactivity scales. Informe Técnico Contract No. 03-318, California Air Resources Board, 2010c. Final Report to the California Air Resources Board, January 27.
- COMEAP. Associations of long-term average concentrations of nitrogen dioxide with mortality. 2018.
- Hang J., Liang J., Wang X., Zhang X., Wu L., y Shao M. Investigation of  $\text{O}_3$ - $\text{NO}_x$ -vocs chemistry and pollutant dispersion in street canyons with various aspect ratios by cfd simulations. *Building and Environment*, 226:109667, 2022.
- Lahaye D. Juretić F. T.M. Modeling a turbulent non-premixed combustion in a full-scale rotary cement kiln using reactingfoam. *Energies*, 15:9618, 2022.
- Meroney R.N., Pavageau M., Rafailidis S., y Schatzmann M. Study of line source characteristics for 2-d physical modelling of pollutant dispersion in street canyons. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 62:37–56, 1996.
- Oke T. Street design and urban canopy layer climate. *Energy and Buildings*, 11(1-3):103–113, 1988.
- Pope III C.A., Burnett R.T., Thun M.J., Calle E.E., Krewski D., Ito K., y Thurston G.D. Lung cancer, cardiopulmonary mortality, and long-term exposure to fine particulate air pollution. *JAMA*, 287(9):1132–1141, 2002.
- Sanchez B., Santiago J.L., Martilli A., Palacios M., y Kirchner F. Cfd modeling of reactive pollutant dispersion in simplified urban configurations with different chemical mechanisms. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16:12143–12157, 2016.

- Secretaría de Estado de Medio Ambiente y Desarrollo Sustentable P.d.S.F. Niveles guía de calidad de aire. 2004. Disponible en: Resolución N° 0201/2004. Provincia de Santa Fe, Argentina.
- World Health Organization. Who global air quality guidelines: Particulate matter (pm2.5 and pm10), ozone, nitrogen dioxide, sulfur dioxide and carbon monoxide. 2021.
- Wu L., Hang J., Wang X., Shao M., y Gong C. Apfoam 1.0: integrated computational fluid dynamics simulation of  $\text{O}_3$ - $\text{NO}_x$ -volatile organic compound chemistry and pollutant dispersion in a typical street canyon. *Geoscientific Model Development*, 14(8):4509–4531, 2021.
- Yang Q., Zhao P., y Ge H. reactingfoam-sci: An open source cfd platform for reacting flow simulation. *Computers and Fluids*, 190:114–127, 2019.
- Zhong J., Cai X.M., y Bloss W.J. Large eddy simulation of reactive pollutants in a deep urban street canyon: Coupling dynamics with  $\text{O}_3$ - $\text{NO}_x$ -voc chemistry. *Environmental Pollution*, 224:171–184, 2017.