

IMPLEMENTACIÓN DE QUÍMICA REACTIVA EN UN MODELO DE MECÁNICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL APLICADO A LA CALIDAD DEL AIRE URBANO EN EL MARCO DEL PROYECTO: LIFE MINOX-STREET

B. Sánchez^{a,b,c}, J. L. Santiago^b, A. Martilli^b, M. L. Palacios^b

^a Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España

^b Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT), Madrid, España

^c Ingeniería y Economía del Transporte (INECO), Madrid, España

E-mail: beatriz.sanchez@ciemat.es

1. Introducción

La contaminación atmosférica por óxidos de nitrógeno (NO_x) debido al tráfico es actualmente uno de los problemas ambientales más importantes en algunas ciudades. Con el objetivo de mitigar este problema, en el marco del proyecto LIFE MINOX-STREET, cofinanciado por el instrumento Financiero para el Medio Ambiente de la Unión Europea, se va a estudiar la eficacia de utilizar materiales comerciales con propiedades fotocatalíticas para reducir la concentración de NO_x aplicados en calzadas, aceras y fachadas de distintos entornos urbanos del municipio de Alcobendas. Para alcanzar este objetivo, el conocimiento previo de la dispersión de contaminantes dentro del área urbana es crucial para la colocación de estos materiales. Por ello, se estimará con alta resolución espacial y temporal, la evolución de los NO_x en un escenario urbano mediante simulaciones con un modelo de mecánica de fluidos computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD). Inicialmente, se desarrollará un estudio del acoplamiento de la dinámica atmosférica y de los procesos químicos que tienen lugar en la atmósfera urbana en una configuración de calles idealizadas. Y se analizará la descripción de la dispersión de los contaminantes al implementar un mecanismo fotoestacionario O₃ – NO – NO₂, y un mecanismo químico reducido más complejo, que consta de 23 especies y 25 reacciones, en el que se considera la influencia de Compuestos Orgánicos Volátiles (COVs).

➤ **Objetivo:** Evaluar las diferencias entre ambos mecanismos para un caso simple con las mismas emisiones de NO_x pero distinta relación de $\frac{NO_x}{COVs}$

2. Modelo CFD

El modelo CFD usado se basa en el promediado de Reynolds de las ecuaciones de Navier-Stokes (Reynolds Averaged Navier Stokes, RANS) con el modelo de turbulencia $k-\epsilon$, que permitirá conocer tanto los patrones de flujo y la turbulencia como la dispersión de contaminantes en un escenario urbano. Este tipo de modelos permiten simular con una muy alta resolución (~ 1 m) el viento y la dispersión dentro de las calles aunque con el inconveniente del alto coste computacional requerido.

2.1. Dinámica Atmosférica

Para estudiar la dispersión de contaminantes es necesario considerar los procesos dinámicos que ocurren en la atmósfera. Utilizando una geometría sencilla, street-canyon, descrita como una calle idealizada con dos edificios uniformes a cada lado de altura H y anchura B.

- Dirección del viento perpendicular a la calle
- El flujo de entrada:

$$U_{in}(z) = \frac{u_*}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) \quad (1)$$

Características:

- Se genera un vórtice central dentro de la calle
- Pequeños vórtices en los laterales inferiores de la calle
- Poca ventilación de la calle

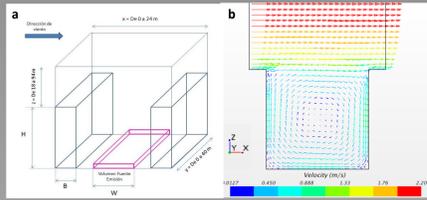


Figura 1. (a) Geometría del dominio en el modelo CFD donde H=18 m, B=3 m, W=9 m y (b) Distribución del flujo dentro y sobre la calle.

2.2. Reacciones Químicas en CFD

Para implementar el mecanismo químico en el modelo CFD, se añade en las ecuaciones de transporte para cada contaminante los términos que definen las reacciones químicas, además, del valor de la fuente de emisión considerado para cada compuesto químico.

$$\frac{\partial[NO]}{\partial t} + U_j \frac{\partial[NO]}{\partial x_j} = D \frac{\partial^2[NO]}{\partial x_j^2} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_c \frac{\partial[NO]}{\partial x_j} \right) + J_{NO_2}[NO_2] - k_1[O_3][NO] + S_{NO} \quad (2)$$

Término Fuente de
Reacciones Químicas Emisión

Donde J y k representan las constantes de fotólisis y las constantes de reacción, respectivamente. Debido a la influencia de la radiación solar en las reacciones químicas es necesario tener en cuenta la temperatura y variación del ángulo cenital respecto a la superficie. Estos datos se calculan considerando la situación geográfica de Alcobendas, un intervalo horario de mayor tráfico [08.00 – 11.00] y una atmósfera despejada de nubes.

3. Mecanismos Químicos

Para comparar los mecanismos químicos se implementan las mismas condiciones iniciales y de contorno en el Street-canyon.

Condiciones Iniciales [ppb]	
NO	5.71
NO ₂	19.67
O ₃	15.79
CO	349.33
SO ₂	1.72
COVs	5.13

Tabla 1. Condiciones iniciales para las especies químicas

Condiciones Iniciales:

Emisiones por tráfico rodado:

Emisión de 0.5 g km⁻¹ de NO_x por vehículo ➔ 930 vehículos por hora ➔

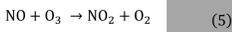
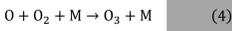
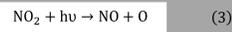
Fuente de Emisión: 9x40x0.3m³

$$S_{NO} = 33.3 \text{ ppb s}^{-1}$$

$$S_{NO_2} = 3.33 \text{ ppb s}^{-1}$$

3.1. Química del Estado Fotoestacionario

El estado fotoestacionario se describe mediante las reacciones químicas:



En la sección vertical del street-canyon que muestra la dispersión de los contaminantes NO, NO₂ y O₃ al final del período de tiempo considerado.

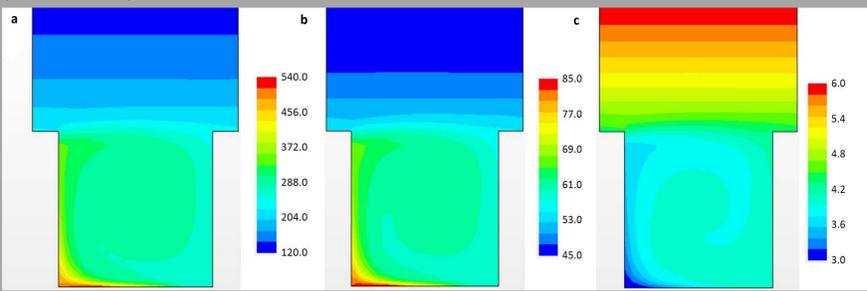


Figura 2. Distribución espacial de la concentración en ppb de (a) NO, (b) NO₂ y (c) O₃ en t=3h implementando el mecanismo químico fotoestacionario.

3.2. Mecanismo Químico Reducido

Por otro lado, se implementa el mecanismo químico complejo donde se consideran emisiones de tráfico de NO_x y COVs. Debido a la variación en las características de los vehículos se observan diferentes proporciones de emisión $\frac{NO_x}{COVs}$, por lo que con este estudio se pretende caracterizar la influencia que tiene considerar las emisiones de COVs en la concentración de los NO_x.

Relación de emisión: $\frac{NO_x}{COVs} = 12.64$

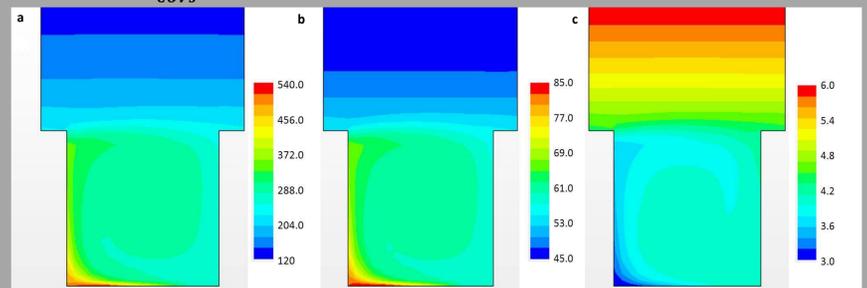


Figura 3. Distribución espacial de la concentración en ppb de (a) NO, (b) NO₂ y (c) O₃ en t=3h utilizando el mecanismo químico complejo con el escenario de emisión NO_x/COVs = 12.64.

Relación de emisión: $\frac{NO_x}{COVs} = 2$

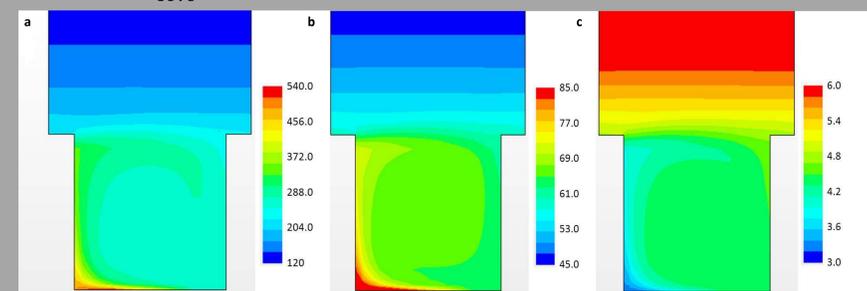


Figura 4. Distribución espacial de la concentración en ppb de (a) NO, (b) NO₂ y (c) O₃ en t=3h utilizando el mecanismo químico complejo con el escenario de emisión NO_x/COVs = 2.

	Emisiones de tráfico [ppb s ⁻¹]	Emisiones de tráfico [ppb s ⁻¹]
NO	33.3	33.3
NO ₂	3.33	3.33
CO	53.7	53.7
VOCS	2.9	18.32
NO _x /COVs	12.64	2

Tabla 2. Escenarios de emisiones de tráfico medio con distinta relación NO_x y COVs

3.3. Evaluación de los mecanismos químicos

Para estudiar el efecto de considerar la presencia de COVs en la concentración de NO_x en la atmósfera se emplean estos dos mecanismos químicos, además de tener en cuenta distinta cantidad de emisión de COVs. Para realizar esta comparación, se realiza el promedio de la concentración de cada contaminante en todo el volumen de la calle obteniéndose los resultados que aparecen en la Fig. 5.

- Para $t < 30 \text{ min}$ ➔ No se observa diferencia entre los distintos escenarios simulados
- Para $t > 30 \text{ min}$ ➔ Existe diferencia entre el mecanismo químico complejo con $\frac{NO_x}{COVs} = 2$ respecto al fotoestacionario
- Para el flujo considerado se obtiene mayor diferencia entre el mecanismo fotoestacionario y el complejo con emisiones altas de COVs ($\frac{NO_x}{COVs} = 2$). Por otro lado, para un flujo con menor velocidad de viento (no mostrado), se observan diferencias entre las tres simulaciones (mecanismo fotoestacionario y mecanismo complejo con bajas y altas emisiones de COVs).

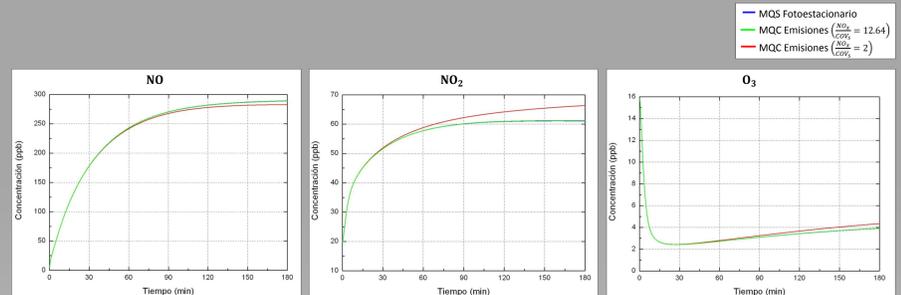


Figura 5. Evolución temporal del promedio de concentración dentro de la calle de NO, NO₂ y O₃ considerando el mecanismo fotoestacionario (azul) y el mecanismo químico reducido con los dos escenarios de emisión, NO_x/COVs = 12.64 (verde) y NO_x/COVs = 2 (rojo).

4. Conclusiones

De los resultados de este estudio se obtienen las características generales del acoplamiento entre la dinámica y la química atmosférica que permiten definir las condiciones en las emisiones donde la implementación de un mecanismo químico complejo es necesario.

- El mecanismo químico complejo demuestra que las concentraciones de los óxidos de nitrógeno en la calle dependen no solo de sus emisiones sino también de la cantidad de emisiones de COVs (No considerado por mecanismo fotoestacionario)
- Cuando las emisiones de COVs son altas ($\frac{NO_x}{COVs} = 2$) el mecanismo fotoestacionario no es suficiente para reproducir las concentraciones de NO_x. Cuando son bajas ($\frac{NO_x}{COVs} = 12.64$) en algunos escenarios con vientos no débiles puede ser suficiente este mecanismo químico simple.

Referencias

- Baik, J.-J., Y.-S. Kang, and J.-J. Kim, 2007: Modeling reactive pollutant dispersion in an urban street canyon. *Atmospheric Environment*, **41** (5), 934–949.
- Baker, J., H. L. Walker, and X. Cai, 2004: 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.
- Bright, V. B., W. J. Bloss, and X. Cai, 2013: Urban street canyons: Coupling dynamics, chemistry and within-canyon chemical processing of emissions. *Atmospheric Environment*, **68**, 127–142.
- Faraldos, M., A. Bahamonde, A. Iglesias, J. Carballo, G. Rovito, and D. Almazán, 2012: Guía Práctica de la Fotocatálisis Aplicada a Infraestructuras Urbanas. 11º Congreso Nacional de Medio Ambiente (CONAMA 2012), Madrid, España.
- Kim, M. J., R. J. Park, and J.-J. Kim, 2012: Urban air quality modeling with full O₃ – NO_x – VOC chemistry: Implications for O₃ and PM air quality in a street canyon. *Atmospheric Environment*, **47**, 330–340.
- Kirchner, F., 2005: The chemical mechanism generation programme CHEMATA-Part 1: The programme and first applications. *Atmospheric Environment*, **39** (6), 1143–1159.

Acciones futuras

- Analizar en diferentes escenarios el rango de $\frac{NO_x}{COVs}$ para el que es necesario considerar la emisión de COVs e implementar el mecanismo químico complejo frente al sistema fotoestacionario
- Modelización de la dispersión de contaminantes considerando las características de depósito de NO_x de los materiales fotocatalíticos considerando los datos experimentales obtenido en el proyecto
- Ampliar el dominio de simulación a una geometría en 3D más compleja ➔ Municipio de Alcobendas

Agradecimientos

Los autores agradecen la ayuda del Dr. F. Kirchner en el diseño del esquema químico complejo generado mediante el programa CHEMATA (Chemical Mechanism Adaptation to Tropospheric Applications) (Kirchner, 2005). Este trabajo está cofinanciado por INECO y por el instrumento Financiero para el Medio Ambiente de la Unión Europea, dentro del marco del proyecto europeo LIFE MINOX-STREET (LIFE12 ENV/ES/000280).