

8-14-2021

Modelamiento ambiental matemático con aplicaciones en R: ejemplos y ejercicios prácticos

Jorge Eduardo Pachón Quinche
Universidad de La Salle, Bogotá, jpachon@unisalle.edu.co

Follow this and additional works at: https://ciencia.lasalle.edu.co/edunisalle_medioambiente

Recommended Citation

Pachón Quinche, Jorge Eduardo, "Modelamiento ambiental matemático con aplicaciones en R: ejemplos y ejercicios prácticos" (2021). *Medioambiente*. 1.
https://ciencia.lasalle.edu.co/edunisalle_medioambiente/1

This Libro is brought to you for free and open access by the Catálogo General at Ciencia Unisalle. It has been accepted for inclusion in Medioambiente by an authorized administrator of Ciencia Unisalle. For more information, please contact ciencia@lasalle.edu.co.

Modelamiento
ambiental matemático
con aplicaciones en R
Ejemplos y ejercicios prácticos



Modelamiento
ambiental matemático
con aplicaciones en R
Ejemplos y ejercicios prácticos

Jorge Eduardo Pachón

Bogotá, D. C.

2021

Pachón, Jorge Eduardo
Modelamiento ambiental matemático con aplicaciones en R : ejemplos
y ejercicios prácticos / Jorge Eduardo Pachón. – Primera edición. –
Bogotá : Ediciones Unisalle, 2021.

136 páginas : gráficas, fotografías ; 23 cm.

Incluye lista de tablas y lista de figuras

Incluye referencias bibliográficas

ISBN 978-628-7510-10-4 (impreso)

ISBN 978-628-7510-12-8 (PDF)

ISBN 978-628-7510-11-1 (ePub)

1. R (Lenguaje de programación de computadores) – Problemas,
ejercicios, etc. 2. Calidad del agua – Modelos matemáticos 3. Calidad del
aire – Modelos matemáticos 4. Ingeniería ambiental – Modelos
matemáticos I. Título

CDD: 519.5 ed.22

CEP-Universidad de La Salle. Dirección de Bibliotecas

ISBN impreso: 978-628-7510-10-4

ISBN PDF: 978-628-7510-12-8

ISBN ePub: 978-628-7510-11-1

Primera edición: Bogotá, D. C., septiembre del 2021

© Universidad de La Salle

© Jorge Eduardo Pachón

Edición

Ediciones Unisalle

Cra. 5 n.º 59A-44, Edificio Administrativo, 3.º piso

PBX: (571) 348 8000, extensiones: 1224 y 1226

edicionesunisalle@lasalle.edu.co

<https://ediciones.lasalle.edu.co/>

Coordinación editorial

Andrea del Pilar Sierra Gómez

Corrección de estilo

Sabina Ojeda

Diagramación

Gina Céspedes González

Diseño de portada

Andrés Pérez

Imprenta

DGP Editores

Queda prohibida la reproducción total o parcial de este libro por
cualquier procedimiento, conforme a lo dispuesto por la ley.

Hecho en Colombia

Contenido

Introducción	1
Capítulo 1. El modelamiento ambiental en los contextos mundial y nacional	5
Evolución de los modelos de la calidad del agua	5
Modelación de la calidad del agua en el contexto colombiano	7
Evolución de los modelos de la calidad del aire.....	10
Modelación de la calidad del aire en el contexto colombiano	13
Capítulo 2. Definición de los modelos matemáticos ambientales	19
Ejemplo de modelación ambiental	22
El <i>software</i> R.....	24
Ejercicios propuestos.....	28
Capítulo 3. Revisión de conceptos básicos de estadística	31
Criterios de desempeño de modelos ambientales	36
Ejercicios propuestos usando el <i>software</i> R.....	40
Capítulo 4. Introducción a los métodos numéricos	45
Series de Taylor	45
Método de Euler	46
Método de Runge-Kutta	49
Diferencias finitas.....	50
Ejercicios propuestos usando el <i>software</i> R.....	54

Capítulo 5. Modelación de la calidad del agua en lagos.....	57
Ejercicios propuestos usando el <i>software</i> R.....	66
Capítulo 6. Modelación de la calidad del agua en ríos y corrientes	69
Modelación de la calidad del agua en ríos.....	73
Ejercicios propuestos usando el <i>software</i> R	88
Capítulo 7. Modelación de la calidad del aire	91
Modelos de caja	91
Modelos de dispersión.....	94
Determinación de la concentración máxima.....	103
Ejercicios propuestos	107
Referencias.....	111
Anexos	121

Lista de tablas

TABLA 1.1. Evolución histórica de la modelación de la calidad del agua en el mundo	7
TABLA 1.2. Algunas aplicaciones del modelo QUAL2K en Colombia en la década 2010-2020	8
TABLA 1.3. Aplicación de los modelos de estimación de emisiones en Colombia en la década 2010-2020.....	14
TABLA 1.4. Aplicación de la modelación fotoquímica en Colombia en el periodo 2000-2020	15
TABLA 1.5. Aplicación de los modelos de receptor en Colombia en la década 2010-2020	17
TABLA 1.6. Aplicación de los modelos de regresión en Colombia en la década 2010-2020	18
TABLA 3.1. Condiciones ambientales de Bogotá durante el año 2012.....	35
TABLA 4.1. Comparación de la solución analítica y la numérica.....	48
TABLA 7.1. Escala de estabilidad atmosférica de Pasquill-Gifford (horas diurnas).....	96
TABLA 7.2. Escala de estabilidad atmosférica de Pasquill-Gifford (horas nocturnas)	97
TABLA 7.3. Valores para la determinación de coeficientes de dispersión atmosférica.....	98
TABLA 7.4. Determinación de los coeficientes de dispersión atmosférica	99

Lista de figuras

FIGURA 2.1. Estimación de la concentración de ozono en Bogotá por el modelo fotoquímico CMAQ.....	20
FIGURA 2.2. Un modelo y sus partes.....	21
FIGURA 2.3. Sistema Integrado de Modelación de Calidad de Aire de Bogotá.....	23
FIGURA 3.1. Precipitación en Bogotá.....	36
FIGURA 3.2. Series de tiempo: valores observados versus valores simulados	39
FIGURA 3.3. Gráfica de dispersión entre los valores observados y los valores simulados.....	40
FIGURA 4.1. Aproximación al valor de una función $f(x)$ mediante el método de Euler.....	47
FIGURA 4.2. Aplicación del método de Euler con diez particiones.....	49
FIGURA 4.3. Aplicación del método de diferencias finitas.....	53
FIGURA 5.1. Balance de masa para un cuerpo de agua bien mezclado (lago o cuerpo léntico)	58
FIGURA 5.2. Ejemplo de la cinética de reacción de primer orden para un contaminante con concentración inicial $C_0 = 100 \text{ mg/L}$ y $k = 0,5 \text{ d}^{-1}$	59
FIGURA 5.3. Variación de la concentración en función del tiempo para el lago del ejemplo 5.1	63
FIGURA 5.4. Variación de la concentración en función del tiempo para el lago del ejemplo 5.2.....	65

FIGURA 6.1. Esquema del transporte unidimensional de contaminantes	70
FIGURA 6.2. Comportamiento de la DBO a lo largo del tiempo	76
FIGURA 6.3. Balance de masa en la zona de mezcla entre un río y un afluente	77
FIGURA 6.4. Teoría de la bicapa de transferencia de masa entre un gas y un líquido	79
FIGURA 6.5. Curva de depleción del oxígeno disuelto	82
FIGURA 6.6. Zonas de sanidad en un río de acuerdo con su concentración de OD	83
FIGURA 6.7. Comportamiento del déficit de OD en función del tiempo	85
FIGURA 6.8. Comportamiento del déficit y de la concentración de OD en función del tiempo	88
FIGURA 7.1. Definición esquemática de un modelo de caja	92
FIGURA 7.2. Sistema de coordenadas cartesianas usado en la dispersión de contaminantes a la atmósfera, siendo el eje x el de la dirección predominante del viento	94
FIGURA 7.3. Coeficientes de dispersión atmosférica horizontal y vertical	97
FIGURA 7.4. Determinación de los coeficientes σ_y y σ_z para una estabilidad atmosférica B y una distancia viento debajo de la chimenea de 3 km	98
FIGURA 7.5. Perfil de concentración versus distancia para la línea de máximos ($y = 0$)	103
FIGURA 7.6. Gráfica de Turner para la determinación de la concentración máxima	104



Introducción

El modelamiento matemático es una herramienta que permite estimar el valor de una variable a partir de una función matemática o estadística y de unos datos de entrada. Por lo general, su aplicación en estudios ambientales tiene el propósito de estimar la concentración de un contaminante en un medio cualquiera (agua superficial, agua subterránea, aire, suelo, subsuelo, mares y océanos, biota); no obstante, se debe tener en cuenta su limitación: un modelo es solo una representación aproximada de la realidad. En particular los modelos ambientales conllevan las limitaciones propias de los sistemas biológicos y la complejidad de las dinámicas en la atmósfera, la hidrósfera y la litósfera.

Los modelos ambientales se usan en diferentes circunstancias, por ejemplo: entender la influencia de fenómenos físicos, químicos o biológicos en una situación de contaminación ambiental, aproximarse al valor de una variable cuando su medición no es posible, evaluar escenarios futuros y diseñar soluciones de control o remediación, explicar episodios de contaminación que ocurrieron en el pasado, pronosticar valores de concentración ambiental, diseñar políticas públicas destinadas al mejoramiento ambiental, entre otras. Este tipo de modelos se utilizan tanto a escala local como regional y global.

Sin embargo, la modelación es solo un eslabón de la cadena de gestión integral de los recursos. Se requiere calibrar y evaluar los

modelos antes de usarlos en la toma de decisiones de política pública. Para este fin se debe contar con información de campo u observaciones que por lo general provienen de redes de monitoreo de los recursos naturales. La calidad y la fiabilidad de esta información repercutirán en los resultados de la modelación. Las incertidumbres asociadas a las mediciones e información de entrada se propagarán a través del ejercicio de modelación.

De manera general, los modelos ambientales son formulaciones matemáticas que se han plasmado y desarrollado en códigos de programación. Su masificación como instrumentos de toma de decisiones se ve limitada por la poca disponibilidad de recursos de cómputo de gran capacidad y por la escasa formación del recurso humano: por un lado, existen profesionales ambientales con baja o nula capacidad de programación y, por otro, hay profesionales entrenados en el desarrollo de *software* que no tienen el bagaje ambiental necesario para abordar este tipo de modelos.

Con base en lo expuesto, este texto busca ofrecer conceptos básicos de modelamiento ambiental e introducir al lector en el uso del lenguaje de programación R. Se sugiere para estudiantes de ciencias básicas o ingenierías de semestres intermedios que preferiblemente hayan tomado cursos de termodinámica, balance de materiales y destino, y transporte de contaminantes. Se incluyen ejemplos resueltos y ejercicios de programación, de tal forma que los estudiantes familiarizados con un lenguaje de cómputo se trasladen sin dificultad al *software* R y los neófitos en el tema incursionen a su propio ritmo.

Es común encontrar en el medio textos que presentan la modelación ambiental por recursos de forma independiente. Si bien esta aproximación permite abordar con mayor detalle teorías y elementos propios de las diferentes matrices ambientales, desconoce también los principios comunes de la modelación y la aplicación de teorías como el balance de materiales o el transporte de contaminantes en todos los medios. Este texto no pretende ahondar en un medio en particular, sino, al contrario, presentar las generalidades de la materia. Esta aproximación conlleva en algunos casos el simplificar, bajo criterios de ingeniería y desarrollos idealizados, situaciones ambientales que de otra forma serían muy complejas de abordar.

En el primer capítulo se presentan los contextos mundial y nacional de la modelación ambiental, con énfasis en los recursos agua

y aire; por tradición, estos han sido los de mayor preocupación y gestión. Además, se hace un recuento de la evolución de los modelos desde su formulación conceptual hasta su aplicación hoy en día y se recopilan experiencias de modelación de calidad del agua y del aire en Colombia en la última década.

El segundo capítulo introduce al lector en la definición de los modelos matemáticos ambientales y de la terminología usada en este campo. Se hace también una introducción al *software* R. El tercer capítulo presenta la revisión de conceptos básicos de la estadística y su aplicación en criterios de desempeño de modelos ambientales. El cuarto capítulo aborda los métodos numéricos como herramientas para solucionar muchos problemas ambientales, en especial aquellos que involucran ecuaciones diferenciales con dependencia del tiempo o del espacio.

Una vez se han construido o afianzado los conceptos básicos del modelamiento, se introduce al estudiante en la modelación de la calidad del agua en sistemas lénticos (quinto capítulo) y lóticos (sexto capítulo), aplicando principios de balance de materiales y de transporte de contaminantes. No se incluyen en este texto el estudio de la hidrodinámica ni la transferencia de calor en sistemas hídricos dada su extensión. El séptimo capítulo aborda la modelación de la calidad del aire con énfasis en modelos de dispersión. Se asume que el lector tiene un conocimiento previo de conceptos meteorológicos, así como de la estimación de emisiones.

Cada uno de los capítulos desarrolla ejemplos acompañados de sus respectivos códigos de programación en lenguaje R. Asimismo, el texto propone ejercicios para que los estudiantes fortalezcan sus habilidades de programación a la par de su capacidad de modelamiento ambiental. Los archivos necesarios para hacer los ejercicios propuestos se encuentran disponibles en el repositorio (<https://github.com/climauls/EnvMod>). En este texto la palabra modelación hace referencia a la modelación matemática, a menos que de modo expreso se indique otro concepto.

Para finalizar quiero expresar mis agradecimientos a los profesores Néstor Mancipe (Universidad Nacional de Colombia) y Olga Lucía Quintero (Universidad EAFIT), quienes brindaron valiosas sugerencias para mejorar este texto en su primera edición. Asimismo, agradezco al Comité Editorial de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de La Salle, en cabeza del decano Ing. Julio César Sandoval, por la positiva aceptación que tuvieron de este libro y su compromiso con su publicación.



Capítulo 1

El modelamiento ambiental en los contextos mundial y nacional

En este capítulo se discutirá la evolución de los modelos ambientales en los contextos mundial y nacional. Se iniciará con una revisión de los modelos de la calidad del agua para luego avanzar hacia los modelos de la calidad del aire. El estudiante notará que la modelación ambiental, a pesar de ser un tema relativamente reciente en Colombia, ha tenido un desarrollo considerable en la última década; además, se espera que su aplicación se incremente en los próximos años.

Evolución de los modelos de la calidad del agua

El profesor Steven Chapra (2011), experto mundial en la calidad del agua, hace un recuento del origen de los modelos. La preocupación por la calidad del agua tiene su origen en la Revolución Industrial y el rápido crecimiento poblacional de Londres (Inglaterra) a mediados del siglo XIX. La proliferación de aguas domésticas y de residuos industriales depositados en el río Támesis, junto con las

altas temperaturas, provocó “el gran hedor de 1858”, el cual generó incomodidad e inconformidad en la población. Esta situación obligó a construir el primer alcantarillado en Londres y se configuró como la creación de la ingeniería sanitaria.

Luego, a inicios del siglo XX, se vio la necesidad no solo de conducir las aguas servidas fuera de las ciudades, sino de depurarlas para mitigar su impacto en los cuerpos de agua naturales. Se les dio origen entonces a las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTARS) que incluían sistemas físicos, químicos y biológicos de diversa complejidad. Asimismo, con el fin de optimizar el tratamiento al menor costo, aparecieron los primeros modelos de la calidad del agua, cuyo objetivo era determinar la calidad del recurso (salidas) bajo diferentes cargas de contaminantes (entradas). El primero de dichos modelos fue la ecuación de Steeter & Phelps (S&P), formulada en 1925 y usada para estimar la concentración mínima de oxígeno disuelto aguas abajo de una descarga de contaminantes (Streeter y Phelps, 1958). Esta formulación matemática es la base de muchos de los actuales modelos de la calidad del agua.

La evolución de estos modelos, desde la formulación de la ecuación de S&P, ha respondido a necesidades sociales y ambientales, así como a la disponibilidad de recursos económicos y de cómputo. La tabla 1.1 presenta de manera cronológica los cambios importantes en la modelación de la calidad del agua pasando de una visión estrictamente sanitaria —que dominó hasta inicios de los años setenta— a la introducción de dinámicas ambientales como la eutrofización y la preocupación por los ecosistemas a modo de complemento para la salud pública. El transitar por diferentes fases ha sido posible gracias al desarrollo continuo de modelos conceptuales y el avance en recursos de cómputo.

Hoy los modelos se usan en la formulación de políticas públicas que buscan mitigar el impacto ambiental en cuerpos de agua debido a las descargas de contaminantes. Las estrategias de control responden a evaluaciones costo-beneficio, esto es, acciones que maximizan el beneficio ambiental al menor costo posible para la sociedad. Se busca hacer una aproximación holística al fenómeno de la modelación, en la cual los modelos hidrodinámicos, de la calidad del agua y los ecológicos estén integrados, como lo es la realidad del recurso. Para complementar el tema se invita a los lectores a revisar la conferencia que ofreció el doctor Chapra en la Universidad de Michigan (Estados Unidos)¹.

¹ Véase Chapra (2014).

TABLA 1.1. Evolución histórica de la modelación de la calidad del agua en el mundo

Fase	Problemas	Contaminantes de interés	Medios considerados	Condiciones de la modelación
1925-1960	Aguas servidas sin tratamiento	Demanda bioquímica de oxígeno (DBO) y bacterias	Corrientes (ríos) y estuarios	-Soluciones analíticas -Sistemas 1-D -Cinética lineal -Geometrías simples -Estado estable
1960-1970	Aguas servidas sin tratamiento y fuentes múltiples	DBO y bacterias	Corrientes (ríos), estuarios y bahías	-Métodos numéricos -Sistemas 2-D -Recursos de cómputo -Estado dinámico
1970-1977	Eutrofización y fuentes no puntuales	Nutrientes	Corrientes (ríos), estuarios, bahías y lagos	-Métodos numéricos -Sistemas 3-D -Sistemas no lineales -Estado dinámico
1977-1990	Compuestos tóxicos y lluvia ácida	Compuestos orgánicos, metales y ácidos	Interacción entre medios	-Métodos numéricos -Sistemas 3-D -Sistemas no lineales -Estado dinámico -Consideraciones económicas
1990-2010	Deterioro ambiental	Compuestos orgánicos emergentes	Sedimentos, aguas subterráneas y cuencas	-Métodos numéricos -Sistemas 3-D -Sistemas no lineales -Estado dinámico -Consideraciones económicas
Actualidad	Evaluación costo-beneficio	DBO, nutrientes y contaminantes emergentes	Cuencas hidrográficas	Modelación holística (hidrodinámica, calidad del agua, ecología)

Fuente: Chapra (2011).

Modelación de la calidad del agua en el contexto colombiano

Según la Asociación Colombiana de Ingeniería Sanitaria y Ambiental (ACODAL), el 70 % de las aguas residuales no cuentan con sistemas de tratamiento en Colombia, lo cual tiene una seria repercusión en la calidad del agua superficial y la salud pública. La modelación

de la calidad del agua en el país representa una herramienta fundamental en el diseño de sistemas de depuración al menor costo y en la evaluación del impacto de diversos vertimientos. La *Política nacional para la gestión integral del recurso hídrico* no solo contempla situaciones de oferta y demanda del recurso, sino también su calidad, sus riesgos, el fortalecimiento institucional y la gobernanza (Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible, MADS, 2010).

Uno de los primeros ejercicios de modelación de la calidad del agua en el país se realizó en el río Bogotá, uno de los más contaminados del mundo. Gracias a una colaboración entre entidades gubernamentales y la academia, en el año 2001 se impulsó un proyecto cuyo objetivo fue implementar, calibrar y verificar modelos de transporte y calidad del agua en el río Bogotá (Empresa de Acueducto y Alcantarillado de Bogotá [EAAB] y Universidad Nacional de Colombia [UNAL], 2008). Usando el modelo QUAL2K y diferentes algoritmos de calibración se logró evaluar diferentes sistemas de tratamiento en los afluentes del río y definir el escenario costo-beneficio más favorable para la depuración del agua. En el marco de este proyecto se definió una metodología para la obtención de modelos predictivos de la calidad del agua (Camacho y Díaz-Granados, 2003). Este ejercicio de modelación del río Bogotá estuvo activo por una década (2000-2010). En los años posteriores el QUAL2K y otros modelos se han utilizado de manera amplia en Colombia para la evaluación de la calidad del agua superficial, como se observa en la tabla 1.2.

TABLA 1.2. Algunas aplicaciones del modelo QUAL2K en Colombia en la década 2010-2020

Modelo	Región/Periodo	Observaciones	Referencia
QUAL2K y HEC-RAS	Bogotá/2010	Cuenca alta del río Bogotá	Mateus García y Camacho (2011); Camacho y Díaz-Granados (2003); EAAB y UNAL (2008)
QUAL2K	Antioquia/2010	Río Aburrá	Área Metropolitana del Valle de Aburrá (AMVA, 2016)
QUAL2K	Nariño/2011	Quebrada Miraflores	Corporación Autónoma Regional de Nariño (Corponariño, 2011)
QUAL2K	Antioquia/2011	Río Aburrá	Cuesta-Parra <i>et al.</i> (2018)
QUAL2K	Caldas/2013	Río Guacaica	Castro y Aristizábal (2015)
QUAL2K	Nariño/2013	Río Molinoyaco	Corponariño (2013)

CONTINÚA

Modelo	Región/Periodo	Observaciones	Referencia
QUAL2K	Cesar/2013	Río Cesar	Universidad del Atlántico (2014)
QUAL2K	Cundinamarca/ 2013	Quebrada El Arenal	Cruz Cárdenas (2016)
QUAL2K y WEAP	Quindío/ 2013-2014	Río La Vieja	Jaramillo <i>et al.</i> (2016)
QUAL2K	Quindío/ 2013-2015	Río Azul	Carreño (2015)
QUAL2K	Valle del Cauca/ 2015	Cuenca alta del río Cauca	Jaramillo <i>et al.</i> (2020)
QUAL2K y HEC-RAS	Cundinamarca/ 2017	Quebrada Chaguaní	Rodríguez y García (2017)

Fuente: el autor.

Las necesidades de modelación hidrodinámica y de calidad del agua en Colombia llevaron a la promulgación en el año 2018 de dos documentos relevantes para el sector: la *Guía nacional de modelación del recurso hídrico para aguas superficiales continentales* (Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible, 2018) y el *Protocolo de modelación hidrológica e hidráulica* (Instituto de Hidrología, Meteorología y Estudios Ambientales [IDEAM], 2018).

La guía pretende dar orientaciones generales para la modelación matemática aplicada a la gestión integral del agua en el país; asimismo, busca unificar criterios y lineamientos en el ámbito nacional, de forma que los ejercicios de modelación que emprendan las diversas autoridades ambientales sean comparables y gocen de rigurosidad técnica y científica. La modelación de la calidad del agua en Colombia tiene en particular tres objetivos: 1) apoyar los planes de ordenamiento del recurso hídrico (PORH) como instrumentos de planificación en las regiones; 2) estimar la zona de mezclado donde se produce la mezcla homogénea del vertimiento con el cuerpo receptor; 3) evaluar el impacto ambiental de vertimientos en cuerpos de agua (Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible, 2018). Así, esta guía define un modelo de calidad del agua como

una representación matemática de los procesos de transporte y degradación de una o varias sustancias en el agua. El propósito principal de un modelo de calidad del agua consiste en establecer el comportamiento más probable del cuerpo de agua en términos de

su capacidad de asimilación y de autodepuración bajo diferentes condiciones de caudal en el cuerpo receptor y de carga contaminante en los tributarios y vertimientos. (Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible, 2018)

La guía establece un protocolo de modelación que deben adoptar las autoridades ambientales y los entes competentes de la gestión del recurso hídrico. Por su parte, el protocolo presenta y explica actividades relacionadas con el conocimiento y entendimiento del sistema por modelar, la conceptualización del modelo, su codificación y programación, la consecución de los datos de entrada, la calibración y validación del modelo, el análisis de sensibilidad y la formulación y simulación de escenarios para la toma de decisiones. Asimismo, expone un listado de *softwares* de modelación de la calidad del agua con sus respectivas características.

Por otro lado, el protocolo tiene como objetivo estimar el volumen de agua que puede ingresar a un sistema (modelo hidrológico); con la modelación hidráulica se busca representar el movimiento del agua dentro de este sistema (IDEAM, 2018). El protocolo presenta las diferentes etapas de la modelación dinámica del agua, así como las principales aplicaciones (*softwares*) de la modelación hidrodinámica, la cual es complementaria y necesaria para la modelación de la calidad del agua.

La existencia de dos documentos, uno de modelación hidrodinámica y otro de modelación de la calidad del agua, tiene la desventaja de independizar dos procesos que se deben estudiar y manejar de forma integral. Expertos en el tema proponen el desarrollo de un documento único integral que incluya estudios de caso y, en el futuro, una modelación acoplada del agua que contemple la hidrología, la hidráulica, la calidad del recurso y los ecosistemas (Rodríguez, 2021).

Evolución de los modelos de la calidad del aire

El profesor Armistead Russell (1997), experto mundial en la calidad del aire, hace un recuento del origen de los modelos enfocados en este recurso. Estos modelos han surgido del interés por entender

la complejidad de las reacciones y transformaciones que suceden en la atmósfera, así como por la necesidad de evaluar distintas estrategias de reducción de contaminantes.

En un principio los modelos de la calidad del aire se formularon con el objetivo de entender y controlar el problema de la lluvia ácida y, en especial, la dinámica de las sustancias precursoras (óxidos de azufre y nitrógeno). Luego los modelos permitieron estudiar la formación de contaminantes secundarios como el ozono, cuya formación en la atmósfera se da por la interacción entre compuestos orgánicos volátiles (VOC) y óxidos de nitrógeno (NO_x) en una secuencia de reacciones no lineales. En los últimos años, los modelos han intentado explicar el destino y transporte del material particulado (PM) y los aerosoles, sobre todo por la degradación de la visibilidad y la afectación de la salud pública.

En este desarrollo de la modelación se ha identificado que las sustancias ácidas, oxidantes, el ozono y el PM, así como sus precursores, pueden viajar cientos de kilómetros. La calidad del aire en un centro urbano, por tanto, se puede ver afectada por lo que sucede en áreas distantes. En esta medida los modelos de la calidad del aire local evolucionan a una escala regional, cuyo dominio de modelación se extiende más allá de las zonas urbanas. Así, los modelos regionales permiten entender la influencia de fuentes viento arriba (*upwind*) y su consecuente impacto viento abajo (*downwind*). Estos modelos se pueden acoplar incluso con modelos a escala global.

Además de tener valor científico, los modelos regionales de la calidad del aire son de gran utilidad en el diseño de estrategias de control de emisiones atmosféricas al menor costo. Sin embargo, la confianza del modelo depende mucho de su correcta evaluación, la cual se posibilita con la existencia de observaciones en campo. Los resultados de la modelación sugieren que las principales incertidumbres no están en la formulación del modelo, sino en la información de entrada, esto es, las emisiones y la meteorología.

Los modelos de la calidad del aire en general se fundamentan en ecuaciones de balance de masas y de transporte de contaminantes que se resuelven de forma numérica, y que permiten simular procesos físicos, químicos y meteorológicos que intervienen en la dispersión y transformación de las emisiones. Estos se pueden clasificar como:

- Modelos de dispersión: asumen una dispersión gaussiana de los contaminantes y su conservación (no reactivos). Se usan en

especial para estimar el impacto ambiental de fuentes puntuales como una chimenea o una tea en un campo petrolero.

- Modelos de caja: se basan en el principio de balance de masa para estimar la concentración de un contaminante cerca de la fuente de emisión bajo diversas simplificaciones: estado estable, mezcla uniforme, volumen fijo del aire, flujo uniforme, emisiones perpendiculares en la caja.
- Modelos fotoquímicos: son herramientas para estimar concentraciones de contaminantes a partir de inventarios de emisiones y condiciones meteorológicas. Simulan la transformación fotoquímica y los procesos de transporte en la atmósfera. Se usan de manera amplia para simular el beneficio ambiental de diversas estrategias de reducción de emisiones.
- Modelos de receptor: se basan en las características físicas y químicas de los gases y partículas presentes en una fuente y un receptor que al estar ambos caracterizados bajo los mismos parámetros, mediante procesos matemáticos o estadísticos, permiten identificar y cuantificar el aporte o contribución de una fuente a las concentraciones presentes en un receptor. En estos modelos es necesario tener un conocimiento aproximado de las diferentes características físicas y químicas de las posibles fuentes de emisión que conllevan el balance másico en las muestras ambientales.
- Modelos de regresión: se basan en relaciones empíricas entre los contaminantes del aire y las variables de uso del suelo o atmosféricas. Son comunes los modelos de regresión que buscan una relación estadística entre los contaminantes y la presencia de vegetación, el área urbana, la estabilidad atmosférica, entre otras variables.
- Modelos reducidos (*reduced-form models*): se basan en los principios científicos de los modelos fotoquímicos logrando una relación directa y aproximada entre las emisiones y las concentraciones ambientales, de tal forma que significan una reducción considerable de tiempo y de recursos de cómputo; además, permiten explorar decisiones de política pública de una forma más sencilla.

Modelación de la calidad del aire en el contexto colombiano

La modelación de la calidad del aire en Colombia ha respondido a diversas necesidades de gestión del recurso. Los modelos de dispersión (gaussianos) se usan de manera amplia en procesos de licenciamiento ambiental. Por su parte, los modelos de estimación de emisiones son útiles en la construcción de inventarios de emisiones y se han aplicado en varios centros urbanos y zonas especiales del país (tabla 1.3). Los modelos fotoquímicos y meteorológicos se han implementado en las principales ciudades (tabla 1.4); pero requieren una mayor cobertura nacional. Asimismo, según la disponibilidad de la caracterización química de contaminantes, se han hecho algunos ejercicios de modelación de receptor (tabla 1.5) e identificación de fuentes. También se tienen experiencias con modelos de regresión de uso del suelo y variables atmosféricas (tabla 1.6).

Estos ejercicios de modelación de la calidad del aire han sido impulsados de modo principal por la academia y la comunidad científica. Al contrario de lo que sucede con la modelación de la calidad del agua, no existen a la fecha guías ni protocolos institucionales de modelamiento de la calidad del aire, salvo algunos lineamientos en estudios de impacto ambiental para modelos de dispersión. En la medida en que más centros urbanos y zonas especiales vean la modelación como una herramienta fundamental en sus planes de gestión de la calidad del aire, se hace necesario la formulación de guías metodológicas que garanticen ejercicios comparativos y rigurosos en el tema.

Tabla 1.3. Aplicación de los modelos de estimación de emisiones en Colombia en la década 2010-2020

Modelo	Región/Periodo	Observaciones	Referencia
<i>International vehicle emissions model</i> o IVE (International Sustainable Systems Research Center [ISSRC], 2008); COPERT (Emisía y European Environment Agency [EEA], 2012); mediciones directas	Bogotá/2012	Se desarrollaron y compararon inventarios de emisiones de fuentes móviles con aproximaciones <i>top-down</i> y <i>bottom-up</i> .	Carmona <i>et al.</i> (2016)
<i>Motor vehicle simulator</i> o MOVES (United States Environmental Protection Agency, 2014)	Bogotá/2012	Se adaptó el modelo MOVES a las condiciones locales de Bogotá. Se estimaron el inventario de fuentes móviles y la influencia de la calidad de los combustibles.	Ramírez <i>et al.</i> (2019)
IVE	Manizales/2014	Se aplicó el modelo IVE en el cálculo de factores de emisión; se desarrolló un aplicativo SIG y código R para la desagregación espacial y temporal denominado DROVE.	González <i>et al.</i> (2017) y Gómez <i>et al.</i> (2018)
<i>Calculation of air pollutant emissions from road transport</i> (COPERT)	Bogotá/2018	Se estimaron los factores de emisión con la metodología COPERT y se acoplaron a un modelo de tráfico.	Mangones <i>et al.</i> (2019, 2020)
Modelo de Emisiones Atmosféricas del Valle de Aburrá (MODEAM)	Medellín/2018	Modelo desarrollado para Medellín y el Valle de Aburrá. Se aplicó el modelo IVE para estimar los factores de emisión y el modelo LEAP para consolidar las emisiones.	Toro (2019)

Fuente: el autor.

TABLA 1.4. Aplicación de la modelación fotoquímica en Colombia en el periodo 2000-2020

Modelo	Región/Periodo	Observaciones	Referencia
<i>Transport and Air Pollution Model</i> (TAPOM) y modelo meteorológico FVM (<i>Finite Volume Model</i>)	Bogotá/2002	Se evaluaron dos versiones del inventario de emisiones en un dominio de modelación de 212 x 212 km con celdas de 4 km con la ciudad de Bogotá en el centro. La evaluación del modelo se hizo con observaciones de la Red de Monitoreo de Calidad del Aire de Bogotá (RMCAAB).	Zárate <i>et al.</i> (2007)
WRF-Chem	Bogotá/2010	Se implementó el modelo WRF-Chem para simular concentraciones de PM10 en Bogotá. Se definieron tres dominios anidados. Se encontró una subestimación al comparar con observaciones de PM10.	Kumar <i>et al.</i> (2016)
CAMX-BRAMS	Medellín/2010	Se implementó el modelo fotoquímico CAMX y el meteorológico BRAMS en dominio de 60 x 60 km ² y 13 niveles verticales que cubre la región del Valle de Aburrá.	Toro <i>et al.</i> (2006) y Toro (2019)
CMAQ (Byun y Ching, 1999) y WRF (<i>Weather Research and Forecasting Model</i> , 2016)	Bogotá/2012	Se actualizó el inventario local de emisiones con fines de modelación. Se definieron tres dominios anidados; el de mayor resolución incluyó a Bogotá con celdas de 1 x 1 km. En un primer momento se observó sobrestimación debido a la magnitud de las emisiones de resuspensión. Se les aplicó el factor de ajuste a estas emisiones, con lo cual se logró la evaluación adecuada del modelo.	Secretaría Distrital de Ambiente (SDA, 2014); Pachón <i>et al.</i> (2018); Pérez- <i>et al.</i> (2017); Nedbor-Gross <i>et al.</i> (2018, 2016)
RLINE (<i>near-roadway environment</i>)	Bogotá/2012	Se realizó la modelación al nivel de la vía con una resolución de 100 m. Los campos meteorológicos se proveyeron desde Aermet.	Pachón <i>et al.</i> (2016) y Snyder <i>et al.</i> (2013)

CONTINÚA

Modelo	Región/Periodo	Observaciones	Referencia
CMAQ-WRF	Bogotá/2014	Se evaluaron diferentes escenarios de reducción de emisiones usando el acople de los modelos CMAQ-WRF en modo de aporte de fuentes.	East <i>et al.</i> (2021)
WRF-Chem	Manizales/2015	Se implementó el modelo de la calidad del aire comparando dos versiones de inventarios de emisiones, uno local y otro global; se obtuvieron mejores resultados con el primero.	González <i>et al.</i> (2017) y González <i>et al.</i> (2018)
LOTOS-EUROS (L-E)	Medellín/2016	Se implementó el modelo de transporte fotoquímico L-E en el Valle de Aburrá para simular concentraciones de PM10 y PM2,5.	López-Restrepo <i>et al.</i> (2020) y Montoya <i>et al.</i> (2020)
WRF-Chem	Bogotá/2018	Se estudió la contribución de fenómenos regionales, como incendios forestales y quemas, en la preparación de terrenos agrícolas.	Ballesteros-González <i>et al.</i> (2020)
WRF-Chem	Bogotá/2019	Se validaron situaciones de alerta ambiental por mala calidad del aire mediante modelación fotoquímica.	Casallas <i>et al.</i> (2020)
Copernicus Atmosphere Monitoring Service (CAMS)	Bogotá/2020	Se cuantificó la influencia de incendios forestales y de polvo del Sahara en la calidad del aire en Bogotá y Medellín.	Méndez-Espinosa <i>et al.</i> (2020)

Fuente: el autor.

TABLA 1.5. Aplicación de los modelos de receptor en Colombia en la década 2010-2020

Modelo	Región/Periodo	Observaciones	Referencia
<i>Positive matrix factorization</i> o PMF (Norris y Vedantham, 2008)	Bogotá/2008	Se colectaron muestras de PM_{10} en dos zonas (residencial y comercial); se realizó la caracterización química y se ejecutó el modelo PMF.	Vargas <i>et al.</i> (2012)
<i>Chemical mass balance</i> (CMB), PCA y MCF	Medellín/2010	Se hizo la caracterización química de $PM_{2,5}$ en tres zonas del Valle de Aburrá y se aplicó el modelo de receptor CMB y el de correlación de fuentes MCF 1.0	Gómez <i>et al.</i> (2010)
PMF	Bogotá/2015-2016	Se realizó la caracterización química del PM_{10} en el transcurso de un año y se aplicó el modelo PMF en la identificación de fuentes de emisión.	Ramírez <i>et al.</i> (2018)
<i>Principal component analysis</i> (PCA) y PMF	Bogotá/2015-2016	Se colectaron muestras de sedimentos RD_{10} y se analizaron químicamente. Se aplicaron modelos PCA y PMF en la identificación de las fuentes.	Ramírez <i>et al.</i> (2019)
PMF	Bogotá/2015-2018	Se hizo la caracterización química de $PM_{2,5}$, PM_{10} y RD_{10} , así como la identificación de la contribución de las fuentes.	García y Parra (2017); Espitia y Porras (2017)
PMF	Barranquilla/2018	Se estudió la composición química del PM_{10} y del $PM_{2,5}$ en la región Caribe de Colombia y se identificaron las principales fuentes de emisión.	Silva <i>et al.</i> (2020)
PCA	Manizales/2018-2019	Se estudió la composición química del PM_{10} y del $PM_{2,5}$ en la ciudad de Manizales y se relacionaron las principales fuentes de emisión.	Franco y Aristizábal (2020)

Fuente: el autor.

TABLA 1.6. Aplicación de los modelos de regresión en Colombia en la década 2010-2020

Modelo	Región/Periodo	Observaciones	Referencia
ARIMA	Bogotá/2014	Se estudió la influencia del uso del suelo en las concentraciones de PM10.	Zafra <i>et al.</i> (2017)
ARIMA	Bogotá/2007-2014	Se estudió la influencia de la estabilidad atmosférica y el uso del suelo en las concentraciones de PM10 y la mortalidad diaria.	Zafra <i>et al.</i> (2021)
MODIS (información satelital)	Varias ciudades/2000-2015	Usando información satelital de aerosoles (AOD) se logró una correlación estadística con observaciones superficiales.	Guevara <i>et al.</i> (2018)
<i>Land use regression</i> (LUR)	Medellín/2007	Se aplicaron modelos de regresión con el fin de predecir concentraciones de PM10 a partir de variables de uso del suelo.	Londoño Ciro y Cañón Barriga (2015)
Modelos lineales generalizados (GLM)	Bogotá/2010-2015	Se emplearon modelos GLM para la interpolación espacial de PM10 usando imágenes satelitales.	Ramírez Gutiérrez (2017)

Fuente: el autor.