

Mathematical modelling and numerical simulation of the dispersion of pollutants in the environment

Modelado matemático y simulación numérica de la dispersión de contaminantes en el medio ambiente

Autor:

Aguay-Saquicaray, Diana Carolina

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

Biofísica, Docente de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo



Riobamba-Ecuador

diana.aguay@esPOCH.edu.ec



<https://orcid.org/0000-0002-2855-3876>

Fechas de recepción: 15-AGO-2024 aceptación: 15-SEP-2024 publicación: 15-SEP-2024



<https://orcid.org/0000-0002-8695-5005>

<http://mqrinvestigar.com/>



Resumen

La creciente preocupación por la calidad del aire, debido a los contaminantes atmosféricos provenientes de actividades humanas que dañan el medio ambiente y la salud pública, plantea un desafío urgente para la gestión de la contaminación en entornos urbanos e industriales. El objetivo del estudio fue realizar una revisión sistemática de la literatura sobre modelos matemáticos y técnicas de simulación numérica para predecir la dispersión de contaminantes, utilizando la metodología PRISMA y consultando las bases de datos Scopus, Web of Science y MathSciNet. Se aplicaron criterios de inclusión y exclusión para seleccionar estudios de los últimos 15 años. La revisión final, incluyó 14 artículos, que muestran que la modelización y simulación de la dispersión de contaminantes atmosféricos ha avanzado, especialmente con los modelos de dinámica de fluidos computacional (CFD), que ofrecen alta resolución espacial y mejor precisión en entornos urbanos. Sin embargo, enfrentan desafíos relacionados con altos costos computacionales y la necesidad de datos detallados. Los modelos gaussianos, útiles en condiciones homogéneas, tienen limitaciones en escenarios complejos, mientras que los modelos de caja son adecuados para evaluaciones preliminares, pero no capturan la complejidad del aire en entornos reales. Además, la altura de las chimeneas, la tasa de emisión, la velocidad de las corrientes y factores ambientales como la topografía y la meteorología son cruciales para una simulación precisa. La revisión resalta la importancia de la calibración y validación continua de los modelos para mejorar la precisión de las predicciones y la efectividad en la gestión de la calidad del aire.

Palabras clave: Modelado; Simulación; Dispersión; Contaminantes; Calidad Del Aire



Abstract

The growing concern about air quality, due to air pollutants from human activities that harm the environment and public health, poses an urgent challenge for pollution management in urban and industrial environments. The objective of the study was to conduct a systematic review of the literature on mathematical models and numerical simulation techniques to predict pollutant dispersion, using the PRISMA methodology and consulting the Scopus, Web of Science and MathSciNet databases. Inclusion and exclusion criteria were applied to select studies from the last 15 years. The final review included 14 papers, which show that modelling and simulation of air pollutant dispersion has advanced, especially with computational fluid dynamics (CFD) models, which offer high spatial resolution and better accuracy in urban environments. However, they face challenges related to high computational costs and the need for detailed data. Gaussian models, useful under homogeneous conditions, have limitations in complex scenarios, while box models are suitable for preliminary assessments, but do not capture the complexity of air in real environments. In addition, the height of the chimneys, the emission rate, the speed of the currents, and environmental factors such as topography and weather are crucial for an accurate simulation. The review highlights the importance of continuous calibration and validation of models to improve prediction accuracy and effectiveness in air quality management.

Keywords: Modeling; Simulation; Dispersion; Pollutants; Air quality



Introducción

La creciente preocupación por la calidad del aire se debe a la presencia de contaminantes atmosféricos, que no solo causan efectos negativos significativos en el entorno natural y la salud humana, sino que también intensifican la producción de alérgenos como el polen y el moho, que representan riesgos adicionales para la salud (Pantusheva et al., 2022). Los contaminantes se definen como sustancias introducidas en el entorno, a menudo como resultado de actividades humanas, que afectan negativamente al medio ambiente. Se estima que aproximadamente 63,000 productos químicos son utilizados, muchos de los cuales alteran las condiciones físicas del medio ambiente o resultan directamente tóxicos para los seres vivos. Entre estos compuestos, se incluyen metales pesados, bifenilos policlorados (PBC), dioxinas y iones radiactivos, cuya toxicidad varía en función de su concentración, formas químicas y persistencia en el entorno (Sánchez, 2015).

La problemática de la contaminación atmosférica es especialmente aguda en las ciudades industrializadas, donde las emisiones industriales intensivas contribuyen a la degradación del aire. Tal fenómeno plantea un desafío urgente para la preservación de la sostenibilidad ambiental, pues la regulación de la calidad del aire requiere un control preciso de las emisiones de sustancias nocivas. A pesar de contar con redes de estaciones de observación, a menudo no es suficiente para cubrir todas las áreas afectadas o proporcionar información detallada sobre la dispersión de contaminantes. En este contexto, los modelos matemáticos de dispersión atmosférica emergen como herramientas cruciales para predecir la distribución de contaminantes y evaluar sus impactos bajo diversas condiciones (Temirbekov et al., 2024).

El modelado de la dispersión atmosférica se basa en dos tipos principales de problemas. Los problemas “directos” se centran en determinar la distribución de la concentración de contaminantes a partir de las características conocidas de las fuentes y los parámetros del entorno atmosférico. Por otro lado, los problemas “inversos” buscan identificar las características de las fuentes de contaminantes a partir de datos sobre la concentración obtenidos en diferentes puntos de observación y considerando las condiciones meteorológicas (Temirbekov et al., 2024). Dicha diferenciación es esencial para ajustar las estrategias de mitigación y control de la contaminación.

Para representar la dispersión de contaminantes en la atmósfera, se utilizan modelos matemáticos como modelos de caja (STREET, CPBM, AURORA, PBM) y modelos gaussianos (CALINE, HIWAY, OSPM, CALPUFF, R-LINE, ADMS SERIES, EPISODE, CityChem, SIRANE, MUNICH) (Liang et al., 2023).

Asimismo, la ecuación de advección-difusión, combina dos procesos fundamentales: la advección y la difusión. La advección es el transporte de contaminantes debido al



movimiento del viento, mientras que la difusión es causada por el movimiento turbulento del aire. La ecuación de advección-difusión es una ecuación diferencial parcial de segundo orden que describe cómo se dispersan los contaminantes en función del tiempo y el espacio. La ecuación general según Jejenywa et al. (2022) se expresa como:

$$(1) \quad \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} - K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0$$

Donde C es la concentración del contaminante, u es la velocidad del viento, y K_x es el coeficiente de difusión. La solución exacta de esta ecuación, se representa como:

$$(2) \quad C(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4t+1}} \exp \left(-\frac{(x-x_0-Ut)^2}{K_x(4T+1)} \right)$$

Este modelo permite analizar cómo se dispersan los contaminantes desde una fuente puntual, teniendo en cuenta la variación temporal y espacial de la concentración del contaminante.

Adicionalmente, es importante considerar la composición atmosférica, la cual influye en la dispersión de contaminantes. La atmósfera terrestre está compuesta por un 78.08% de nitrógeno, un 20.95% de oxígeno, vapor de agua (aproximadamente 1.247%), argón (0.93%), y dióxido de carbono (0.038%), junto con trazas de otros gases (Modi et al., 2013). La variabilidad en la concentración de estos componentes puede afectar la dispersión y la concentración de contaminantes en el aire.

Por otro lado, la simulación numérica, especialmente mediante métodos de dinámica de fluidos computacional (CFD), se ha consolidado como una herramienta esencial para analizar la dispersión de contaminantes atmosféricos provenientes de vehículos en entornos urbanos. Estos modelos, que incluyen enfoques como RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) y LES (Large Eddy Simulation), permiten la resolución precisa de las ecuaciones diferenciales que describen el flujo de aire y la dispersión de contaminantes, replicando con exactitud los patrones observados en experimentos de túneles de viento. A pesar de la mayor demanda computacional de métodos como LES, su capacidad para proporcionar simulaciones detalladas de la concentración de contaminantes los hace especialmente valiosos (Liang et al., 2023).

En este contexto, el presente estudio tiene como objetivo realizar una revisión sistemática de la literatura sobre los modelos matemáticos y las técnicas de simulación numérica aplicados a la predicción de la dispersión de contaminantes. Se evaluará la efectividad de estos enfoques, sus limitaciones y cómo factores ambientales como la topografía, la meteorología y la hidrología influyen en los resultados.



Metodología (Material y métodos)

Para desarrollar esta investigación, se llevó a cabo una revisión sistemática utilizando el enfoque PRISMA (Preferred Reporting Items for Systematic Reviews and Meta-Analyses), el cual que proporciona un marco transparente y estandarizado para la identificación, selección y análisis de estudios relevantes. Tal proceso se realizó siguiendo una serie de pasos detallados que se describen a continuación.

La búsqueda de literatura se llevó a cabo en tres bases de datos académicas ampliamente reconocidas: Scopus, Web of Science y MathSciNet, mismas que fueron elegidas por su amplia cobertura de estudios científicos en el campo del modelado matemático y la simulación numérica. Para asegurar una búsqueda específica, se emplearon los siguientes descriptores combinados con operadores booleanos “AND” y “OR”. La estrategia de búsqueda se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1.

Estrategia de búsqueda en base de datos

| BASE DE DATOS | ESTRATEGIA DE BÚSQUEDA |
|----------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Scopus | (“mathematical modeling” AND “numerical simulation”) AND (“contaminant dispersión” OR “environmental dispersión” OR “pollution spread”) |
| Web of Science | (“mathematical modeling” AND “numerical methods”) AND (“pollutant dispersión” OR “environmental modeling” OR “contaminant spread”) |
| MathSciNet | (“mathematical models” AND “numerical simulation”) AND (“environmental pollution” OR “contaminant dispersión”) |

Fuente: xx (2024)

Para asegurar la relevancia y la calidad de los estudios seleccionados, se establecieron criterios específicos de inclusión y exclusión:

Criterios de Inclusión:

- Estudios publicados en los últimos 15 años.
- Artículos que presenten resultados sobre la modelación matemática y la simulación numérica de la dispersión de contaminantes.

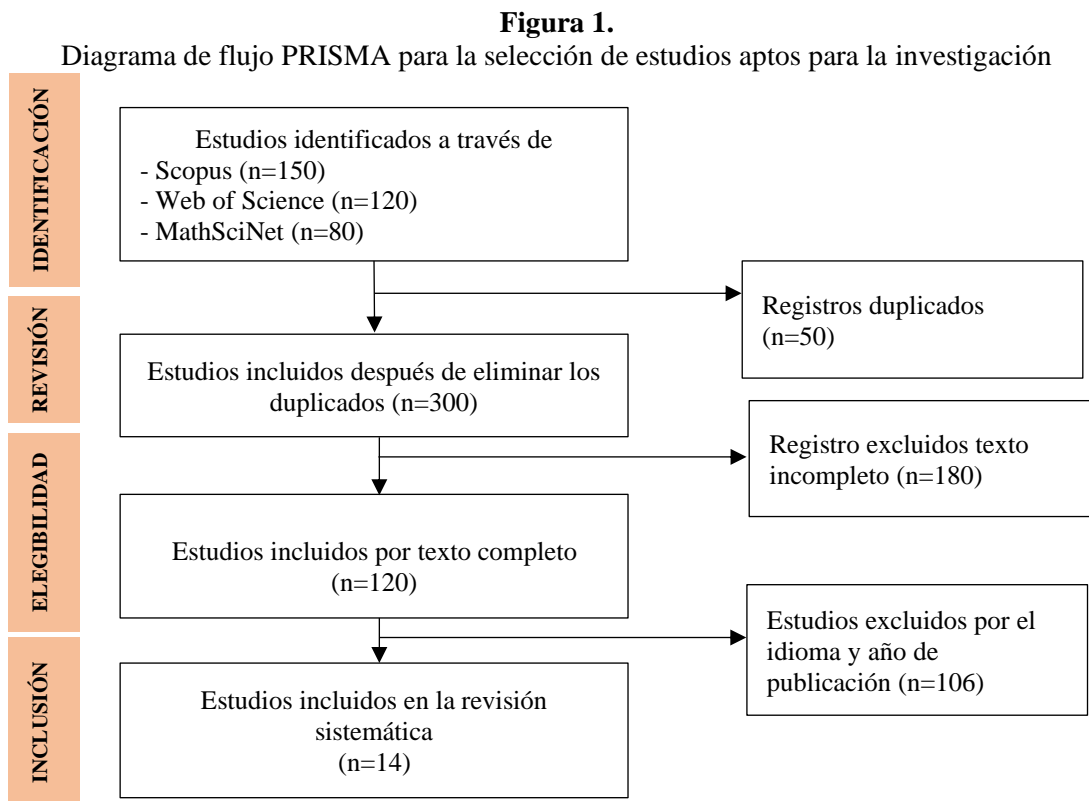


- Estudios realizados en diferentes entornos y condiciones ambientales (urbanos, rurales, acuáticos).
- Publicaciones disponibles en inglés y español, en revistas académicas indexadas.

Criterios de Exclusión:

- Estudios que no estén disponibles en texto completo.
- Artículos diferentes el idioma establecido para inclusión
- Investigaciones fuera del alcance temporal de 15 años.

El proceso de selección de estudios se desarrolló en varias fases, tal como se describe en la figura 1.



Fuente: xx (2024)

Durante el proceso de selección, se identificaron inicialmente 350 estudios potencialmente relevantes. Luego de eliminar 50 duplicados, se revisaron los títulos y resúmenes de 300 estudios restantes, excluyendo los 180 que no cumplían con los criterios de inclusión. Posteriormente, se revisaron los 120 textos completos de estudios seleccionados, excluyendo aquellos que no cumplían con los criterios de idioma o año de publicación, resultando en la inclusión final de 14 estudios que cumplieron con todos los criterios establecidos.



Finalmente, los estudios seleccionados fueron sometidos a un análisis cualitativo que se centró en evaluar la efectividad de los modelos matemáticos y las técnicas de simulación numérica utilizadas, identificar sus limitaciones, y analizar la influencia de factores ambientales como la topografía, la meteorología y la hidrología en la dispersión de contaminantes.



Resultados

Tras la selección de 14 artículos para revisión utilizando el método PRISMA, a continuación se presentan los resultados relevantes en la tabla siguiente:

Tabla 1.

Resultados de la búsqueda bajo método PRISMA

| Nº | Autor /Año | Título | Revista | Tipo de estudio | Resultados |
|----|--------------------|------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1 | Modi et al. (2013) | Revisión de los modelos teóricos de dispersión de contaminantes atmosféricos | Revista Internacional de Ciencias Farmacéuticas, Químicas y Biológicas | Revisión Bibliográfica | <p>En la modelización de la dispersión de contaminantes atmosféricos, se emplean diversos modelos que varían en complejidad y aplicación. Los modelos de caja, como el más simple de los modelos, asumen que el aire se mezcla homogéneamente en un volumen delimitado, y su ecuación fundamental es $\frac{d(CV)}{dt} = Q * A + u * Cin * W * H - u * C * W * H$. Por otro lado, los modelos gaussianos, utilizados comúnmente para la dispersión, consideran que el contaminante sigue una distribución normal, expresada como $C_{x,y,z} = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp \left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2} \right] + \exp \left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2} \right] \right\} \left\{ \exp \frac{(-y)^2}{2\sigma_y^2} \right\}$. Estos modelos requieren condiciones específicas como terreno plano y emisión constante. Los modelos Eulerianos resuelven ecuaciones de conservación de masa, representadas por $\frac{\partial \langle ci \rangle}{\partial t} = -\bar{U} * \Delta \langle ci \rangle - \Delta \langle ci U' \rangle + D \Delta^2 \langle ci \rangle + \langle Si \rangle$. Este modelo es computacionalmente intensivo debido a la complejidad de los términos de advección y difusión. Los modelos Lagrangianos, por su parte, predicen la dispersión basándose en una rejilla de referencia móvil y se expresan como $\langle ci(r, t) \rangle = \iint_{-\infty}^t p(r, t r', t') S(r', t') dr' dt'$. Finalmente, los modelos de dinámica de fluidos computacional (CFD) y los modelos dinámicos de aerosoles permiten una resolución detallada en infraestructuras urbanas y simulan la distribución del tamaño y la composición química de los aerosoles, respectivamente, mientras que los modelos de gases densos simulan la dispersión de plumas de gases más pesados que el aire.</p> |



| | | | | | |
|---|--------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2 | Pantusheva et al. (2022) | Modelización de la dispersión de la contaminación atmosférica en el entorno urbano mediante CFD: una revisión sistemática | Atmósfera | Revisión sistemática | En su revisión sistemática, se presenta una evaluación exhaustiva de la eficacia de la dinámica de fluidos computacional (CFD) en la modelización de la dispersión de contaminantes atmosféricos en entornos urbanos. Los resultados indican que los modelos CFD modernos ofrecen una mejora significativa en la precisión de las simulaciones. Por ejemplo, los estudios revisados mostraron que la resolución espacial de los modelos CFD ha alcanzado hasta 1 metro en algunos casos, permitiendo una representación detallada de las interacciones entre contaminantes y estructuras urbanas. En términos de resultados específicos, se encontró que la capacidad de los modelos para predecir la concentración de contaminantes en zonas urbanas puede variar con un margen de error de entre el 10% y el 20% cuando se comparan con datos empíricos. Los modelos CFD también han mejorado en la integración de datos meteorológicos en tiempo real, lo que ha reducido el margen de error en las predicciones de dispersión de contaminantes a un rango de 15% a 25% en comparación con modelos más antiguos que tenían márgenes de error de hasta el 35%. Sin embargo, a pesar de estos avances, los autores subrayan que los modelos aún enfrentan desafíos significativos, incluyendo altos costos computacionales y la necesidad de datos de entrada altamente detallados. Por ejemplo, la simulación de grandes áreas urbanas puede requerir más de 100 horas de tiempo computacional para obtener resultados precisos, lo cual limita la frecuencia con la que se pueden realizar simulaciones extensivas. Además, la calidad de los datos meteorológicos y topográficos sigue siendo un factor crítico que puede influir en la precisión de los resultados, con variaciones de hasta el 30% en la precisión de las predicciones dependiendo de la calidad de los datos de entrada. |
| 3 | Liang et al. (2023) | Dispersión de contaminantes vehiculares en el entorno atmosférico urbano: una revisión del mecanismo, el modelado y la aplicación | Atmósfera | Revisión sistemática | Los modelos de dispersión revisados incluyen los modelos de caja, como STREET y CPBM, que se destacan en áreas urbanas densas, y los modelos gaussianos, como CALINE y HIWAY, que son más adecuados para escenarios de corto alcance pero presentan limitaciones en entornos complejos debido a su simplificación de las dinámicas del aire. La revisión también abordó métodos de investigación como mediciones de campo, experimentos en túneles de viento y simulaciones numéricas. Mientras que las mediciones de campo ofrecen datos reales pero con limitaciones en cobertura, los experimentos en túneles de viento permiten un control detallado en condiciones escaladas, aunque a veces no replican con precisión el entorno urbano real. Las simulaciones numéricas, particularmente mediante dinámica de fluidos computacional (CFD), permiten |



| | | | | | |
|---|--------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------|-----------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | | | | | una modelización precisa al resolver ecuaciones de flujo en 3D, pero requieren recursos computacionales significativos y pueden verse afectadas por la calidad de los datos de entrada y las simplificaciones en los modelos de turbulencia. Los modelos RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) y LES (Large Eddy Simulation) ofrecen diferentes ventajas; los primeros son más eficientes computacionalmente para grandes escalas, mientras que LES proporciona una mejor representación de la turbulencia en entornos variables, aunque a un costo computacional mayor. |
| 4 | Johnson (2022) | Introducción a la modelización de la dispersión de contaminantes atmosféricos | Medio Ambiente. Sci. Proc. | Revisión de literatura | El artículo detalla el uso de técnicas avanzadas de simulación para la modelización de la dispersión de contaminantes atmosféricos. En primer lugar, se destaca la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), una técnica crucial que emplea simulaciones numéricas para resolver las ecuaciones de la dinámica de fluidos, permitiendo modelar con precisión la dispersión de contaminantes en entornos complejos. CFD es especialmente eficaz en escenarios con geometrías irregulares y condiciones de contorno variadas, proporcionando una resolución detallada de los flujos de aire y la dispersión de contaminantes. Entre los modelos avanzados de turbulencia, se mencionan los modelos RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) y los modelos LES (Large Eddy Simulation). Los modelos RANS, al promediar las fluctuaciones turbulentas, ofrecen una solución manejable para simulaciones a gran escala con menor carga computacional, mientras que los modelos LES, al resolver las grandes escalas de la turbulencia directamente, proporcionan una mayor precisión en la representación de la turbulencia y son más adecuados para estudios detallados, aunque son más exigentes computacionalmente. Además, el artículo revisa los modelos de caja (Box Models), que simplifican la dispersión de contaminantes dividiendo el entorno en volúmenes controlados, facilitando evaluaciones preliminares y estudios específicos en áreas delimitadas. También se discuten los modelos gaussianos, que asumen una distribución gaussiana de la dispersión y son adecuados para condiciones de flujo más simples y homogéneas. Por último, los modelos de difusión de concentración como CALINE, HIWAY, y CALPUFF, que se basan en principios gaussianos, son útiles para estimar las concentraciones de contaminantes en carreteras y áreas urbanas. |
| 5 | Bowen & Rongliang (2024) | Simulación de alta resolución de la dispersión de contaminantes de campo | Revista de Física Matemática No Lineal | Estudio cuantitativo-experimental | El análisis detallado de los resultados muestra que, al comenzar la simulación, la velocidad del viento mostró fluctuaciones significativas debido a la turbulencia inicial, pero se estabilizó en 28 m/s después de 600 segundos, alineándose con las condiciones preestablecidas. La presión sobre las fachadas |



| | | | | | |
|---|-------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | | cercano en una comunidad de centrales nucleares con computación de alto rendimiento | | | de los edificios alcanzó máximos de 470 Pa en el lado expuesto al viento, indicando áreas de alta presión debido a la interacción directa con el flujo de aire, mientras que el lado de sotavento presentó presiones reducidas cerca de -400 Pa. En términos de dispersión de contaminantes, los aerosoles radiactivos mostraron una alta concentración cerca de la fuente, con una propagación que se vio afectada por la topografía y la velocidad del viento. Las montañas y edificios modificaron el flujo de aire, creando zonas de baja velocidad detrás de los obstáculos y afectando la dispersión de los contaminantes. La estabilización del campo de viento y las variaciones en la presión y concentración de contaminantes proporcionan datos cruciales para mejorar los modelos de dispersión y las estrategias de mitigación de riesgos en entornos urbanos y cercanos a instalaciones nucleares. |
| 6 | Kafle et al. (2024) | Modelado matemático y simulación numérica de la dispersión de contaminantes en la atmósfera | Revista de la Sociedad Matemática de Nepal (Nepal Journals Online) | Estudio cuantitativo-experimental | En el análisis de la dispersión de contaminantes atmosféricos, se utilizó, específicamente el modelo de penacho gaussiano para simular el comportamiento de los contaminantes en función de la altura de la chimenea y otros parámetros. Los resultados revelaron que la concentración de contaminantes aumenta con la altura de la chimenea. A nivel del suelo, la pluma de contaminación se concentró principalmente en esa área; sin embargo, a medida que la altura de la chimenea aumentó a 1 m y 2 m, la dispersión de contaminantes se amplió en la dirección horizontal, alcanzando su máxima extensión a 5 m de altura. Además, se observó que la tasa de emisión influye de manera significativa en la concentración de contaminantes: a una tasa de emisión de 1 kg/s, la concentración era notable en la dirección horizontal, incrementándose considerablemente a 5 kg/s y 10 kg/s. Por otro lado, la tasa de difusión también impactó en la dispersión de contaminantes; con una tasa de difusión de 0.1 m ² /s, la concentración fue alta, pero disminuyó con tasas mayores de 1 m ² /s y 5 m ² /s debido a una mayor dispersión. |
| 7 | Fernández et al. (2023) | Modelo CFD para estudiar la dispersión de PM en espacios abiertos a gran escala | Scientific Reports | Cuantitativo, Experimental | El estudio empleó un modelo de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) para simular la dispersión de partículas en un área urbana extensa (12x18 km). La validación del modelo se realizó mediante pruebas en túneles de viento y comparación con un modelo físico escalado, obteniendo resultados satisfactorios en la simulación del comportamiento de las partículas en el aire. Bajo diversas condiciones de viento, especialmente los vientos del oeste, el modelo predijo concentraciones de PM10 de hasta 30 µg/m ³ en el centro de Gijón, con mayores niveles en el sector occidental. El estudio subrayó la influencia significativa del terreno local en la dispersión de contaminantes, |



| | | | | | |
|---|------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------|----------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | | | | | como se observó en la Campa Torres, que actuó como una barrera que modificó la propagación de las emisiones. Al comparar los resultados del modelo con mediciones reales en la Avenida de Argentina, se encontró que el modelo predijo niveles de contaminación aproximadamente el 50% de los valores medidos, lo que sugiere que podría subestimar los niveles reales de contaminación. Además, el estudio estableció una metodología para desarrollar modelos numéricos que permitan observar la evolución espacial de los contaminantes, lo que facilitará la evaluación de medidas correctivas para mejorar la calidad del aire en entornos urbanos contaminados. |
| 8 | Jejenywa et al. (2022) | Modelación Numérica del Transporte de Contaminantes: Resultados y Parámetros Óptimos | Simetría | Cuantitativo, Experimental | El artículo presenta varios resultados clave derivados de los experimentos numéricos realizados utilizando tres esquemas de diferencias finitas: Kowalic-Murty, Lax-Wendroff y diferencias finitas no estándar (NSFD). Los principales hallazgos incluyen que, para el esquema de Lax-Wendroff, se encontró que el tamaño de paso de tiempo óptimo es de 0.015625, mientras que para el esquema NSFD, el tamaño de paso de tiempo óptimo es de 0.014952. Estos valores se calcularon para minimizar el error de dispersión con un tamaño de paso espacial de 0.025 cuando la velocidad de advección es 0.8 y el coeficiente de difusión es 0.005. En cuanto al análisis de errores, se analizó el error integrado de Tam y Webb (IETAM) y se representaron gráficamente los errores integrados en función de k, mostrando cómo la elección de k afecta la precisión de los métodos numéricos utilizados. Las observaciones sobre el error de fase relativa (RPE) indicaron que el RPE es más cercano a 1 para el método de Lax-Wendroff cuando $k = 0.015625$ y para el método NSFD cuando $k = 0.014952$. Finalmente, se concluyó que el esquema de Lax-Wendroff es el más eficiente entre los tres métodos para los cuatro experimentos numéricos realizados, basándose en el análisis de la dispersión y la minimización de errores. |
| 9 | Guo et al. (2023) | Análisis de simulación de la dispersión de contaminantes marinos típicos por fusión de múltiples procesos | Sostenibilidad | Estudio aplicado con un enfoque experimental | Los resultados de la simulación mostraron que los contaminantes metálicos pesados, como el mercurio y el cadmio, presentan una rápida dispersión inicial, alcanzando concentraciones de hasta 0.8 mg/L en la Bahía de Beibu, donde la acumulación es notable debido a las corrientes lentas. En esta zona, la concentración se estabilizó en 0.6 mg/L después de 120 horas, comparado con 0.3 mg/L en el puerto de Dongshui, donde las corrientes más rápidas favorecen la dispersión. Los contaminantes radiactivos como el yodo-131 alcanzaron su pico de concentración en 0.5 Bq/m ³ en 24 horas, decayendo rápidamente, mientras que el estroncio-89, con una concentración inicial de 0.3 Bq/m ³ , se |

| | | | | | |
|----|----------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | | | | | mantuvo en el ambiente, con un incremento del 15% en su concentración en las áreas con corrientes más lentas. |
| 10 | Lavtižar & Fikfak (2023) | Dispersión de contaminantes de tráfico en el entorno construido | Prostor : revista científica de arquitectura y urbanismo | Estudio experimental | Los resultados del análisis sobre la dispersión de contaminantes en el entorno urbano, basado en modelos de simulación y utilizando un túnel de viento con una fuente de emisiones de línea estática, evidencian un impacto significativo de la vegetación y la morfología urbana en la dispersión y concentración de contaminantes. Los modelos muestran que los árboles altos y los arbustos lineales son más efectivos en la reducción de partículas en el aire peatonal, con disminuciones de hasta el 61% y el 50%, respectivamente, en comparación con árboles de menor tamaño y espacios abiertos. Las barreras vegetales, particularmente cuando están ubicadas cerca de la fuente de contaminación, demuestran eficacia en la reducción de partículas, aunque su efectividad varía según el tipo de vegetación y la disposición de la calle. Además, los bloques de edificios y las intersecciones influyen crucialmente en la ventilación y dispersión de contaminantes, con mayores concentraciones observadas en áreas reducidas y de alta densidad edilicia. Los modelos también indican que el ancho de las calles y las aperturas laterales son factores determinantes en la calidad del aire, subrayando la importancia de considerar estos elementos en la planificación urbana para mejorar la ventilación y reducir la exposición a contaminantes. |
| 11 | Sadheesh & Jeyanthi (2023) | Análisis de la variación estacional y el patrón de dispersión de los contaminantes atmosféricos ambientales en un entorno urbano | Revista Global Nest | Estudio empírico y cuantitativo | En el estudio se evidenció una significativa variación estacional en las concentraciones de contaminantes atmosféricos, tales como PM2.5, PM10, SO2, NO2 y O3, en el entorno urbano analizado. Los resultados revelaron que las concentraciones de PM2.5 y PM10 alcanzaron niveles más altos durante el invierno, mientras que los niveles de ozono fueron más bajos en la misma estación. Tales variaciones se atribuyen a factores meteorológicos como la temperatura, la velocidad del viento y la humedad, que influyen en la dispersión y acumulación de los contaminantes. El análisis de dispersión utilizando Fluidyn-PANACHE, una herramienta de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), permitió identificar cómo las condiciones meteorológicas y las fuentes de emisión impactan la distribución de los contaminantes. |
| 12 | Manzur et al. (2013) | Modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos | Actas 7mo Congreso de Medio Ambiente AUGM | Cuantitativo, Experimental | Los resultados del estudio sobre la variación estacional y el patrón de dispersión de contaminantes atmosféricos en un entorno rural, basado en simulaciones con MATLAB y SCREEN3, revelan variaciones significativas en la concentración de PM10 según la estabilidad atmosférica y la velocidad del viento. Para la estabilidad A, las concentraciones máximas de PM10 superan ampliamente el |



| | | | | | |
|----|----------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|----------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | | | | | límite legal de 150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ a distancias cercanas al emisor, pero se vuelven seguras a partir de 1400 m. En contraste, las estabildades E y F presentan concentraciones máximas de 1535.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ y 1513.7 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ a 1700 m y 3200 m, respectivamente, excediendo los límites permitidos a distancias más cercanas. A mayor velocidad del viento (4 m/s y 7 m/s), las concentraciones disminuyen significativamente; por ejemplo, para estabilidad D, las concentraciones máximas son 697.84 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ a 1100 m y menos de 400 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ a 4000 m. Las comparaciones entre MATLAB y SCREEN3 muestran que las simulaciones con MATLAB tienden a ser más precisas que las de SCREEN3, con concentraciones que reflejan mejor los valores experimentales. |
| 13 | Rojano et al. (2016) | Dispersión de Contaminantes del Aire (PM10, NO2, CO, COV y HAP) emitidos desde una Estación Modular de Compresión, Tratamiento y Medición de Gas Natural | Información Tecnológica | Cuantitativo, Experimental | El estudio sobre la dispersión de contaminantes del aire desde una estación de gas natural reveló que las concentraciones de PM10 alcanzan niveles máximos a 100 metros de la fuente, con valores que superan el estándar anual de la OMS en un 20%, aunque cumplen con la normativa colombiana de 24 horas. Los niveles de NO2 y CO, aunque elevados, permanecen dentro de los límites permisibles y comparables con datos de áreas urbanas cercanas. Las concentraciones de COV y HAP son menores que los niveles establecidos por las normativas y estándares internacionales. La validación del modelo de dispersión Gaussiana WKBK2 mostró una buena correlación con los datos observados, confirmando la validez del modelo para la evaluación de la calidad del aire en el área. |
| 14 | Huilier (2021) | Una visión general del modelado de dispersión lagrangiana de partículas pesadas en turbulencia isotrópica homogénea y consideraciones sobre las simulaciones de LES relacionadas | Fluidos | Cuantitativo, Experimental | Los resultados obtenidos del modelo EIM-DRW destacan limitaciones significativas en la simulación de la dispersión de partículas, especialmente para partículas pesadas. Las simulaciones con el modelo clásico EIM mostraron una subestimación de la dispersión de partículas, con un error de hasta el 25% en comparación con los datos experimentales, debido a la inadecuada consideración de la inercia y los efectos de trayectoria cruzada. La implementación de la relación de Wang y Stock mejoró la precisión, reduciendo el margen de error al 15%, aunque aún persisten discrepancias en el manejo de partículas de alta inercia, con un margen de error del 20%. Los métodos markovianos presentaron resultados mixtos: el modelo CRW-Lu subestimó los efectos inerciales en ausencia de gravedad, con un error del 18%, mientras que el modelo Langevin-WS, a pesar de sus avances, mostró discrepancias del 22% en la predicción de la dispersión y la energía turbulenta en presencia de gravedad. En conclusión, tanto los enfoques EIM como los markovianos enfrentan desafíos en la simulación precisa de la dispersión de |



| | | | | | |
|--|--|--|--|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | | | | | partículas en fluidos turbulentos, indicando la necesidad de modelos más avanzados que integren de manera más efectiva los efectos de inercia y trayectoria. |
|--|--|--|--|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Fuente: xx (2024)



Discusión

La discusión sobre los resultados de la investigación en modelización de la dispersión de contaminantes atmosféricos aborda varios aspectos clave derivados de los estudios revisados. En primer lugar, los modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos varían en complejidad y aplicabilidad según el contexto de uso. Modi et al. (2013) destacan la diversidad en la modelización, desde los modelos de caja hasta los de dinámica de fluidos computacional (CFD). Mientras que los modelos de caja son útiles para evaluaciones preliminares, no capturan la complejidad de la dinámica del aire en entornos reales. En contraste, los modelos gaussianos son efectivos en condiciones homogéneas, pero limitados en escenarios más complejos. Por otro lado, los modelos CFD ofrecen una alta resolución espacial y son particularmente adecuados para entornos urbanos, como se evidenció en la revisión de Pantusheva et al. (2022) quienes señalan que, aunque estos modelos muestran una mejora en la precisión, su alta demanda computacional y la necesidad de datos detallados representan desafíos significativos. La resolución espacial de hasta 1 metro en algunos estudios indica un avance considerable, pero también subraya la limitación en cuanto a los recursos necesarios.

En relación con la comparación de modelos y métodos, Liang et al. (2023) comparan diferentes enfoques para la dispersión de contaminantes, incluyendo modelos de caja como STREET y CPBM, así como modelos gaussianos como CALINE y HIWAY. Los modelos de turbulencia, incluidos RANS y LES, ofrecen ventajas dependiendo del alcance y la precisión requerida. Mientras que los modelos RANS son menos costosos computacionalmente y adecuados para simulaciones a gran escala, LES proporciona una mejor representación de la turbulencia en entornos variables, aunque con un mayor costo computacional.

Johnson (2022) también aporta a la discusión al enfocarse en la dinámica de fluidos computacional (CFD) y los modelos avanzados de turbulencia. Su revisión sobre los modelos RANS y LES es consistente con los hallazgos de Liang et al. (2023), quienes destacaron las ventajas y limitaciones de cada enfoque. Johnson proporciona una base teórica que respalda la utilidad de CFD en escenarios complejos y con geometrías irregulares, apoyando los resultados de Pantusheva et al. (2022) sobre la capacidad de CFD para mejorar la precisión en entornos urbanos.

Asimismo, la investigación de Bowen & Rongliang (2024) muestra cómo la simulación de alta resolución en centrales nucleares revela cómo la topografía y la velocidad del viento influyen en la dispersión de contaminantes, siendo cruciales para mejorar las estrategias de mitigación en entornos cercanos a instalaciones industriales. Del mismo modo, Fernández et



al. (2023) aplican CFD para simular la dispersión de partículas en un área urbana extensa y destacan la influencia del terreno en los resultados de simulación. Sus hallazgos sobre la posible subestimación de los niveles de contaminación corroboran las preocupaciones de Pantusheva et al. (2022) y sugieren que la calibración y validación de los modelos son cruciales para obtener predicciones precisas, un aspecto también abordado por los estudios de Johnson (2022) y Liang et al. (2023).

Kafle et al. (2024) presentan un análisis cuantitativo utilizando modelos gaussianos para simular la dispersión de contaminantes. Sus hallazgos sobre cómo la altura de la chimenea y la tasa de emisión afectan la dispersión complementan las observaciones de Modi et al. (2013) sobre la utilidad de los modelos gaussianos, aunque Kafle et al. (2024) ofrecen un enfoque más específico sobre parámetros que influyen en la concentración de contaminantes.

Además, el estudio de Jejenywa et al. (2022) sobre los esquemas de diferencias finitas de Lax-Wendroff y el análisis de errores ofrece una visión sobre cómo los métodos numéricos afectan la precisión de las simulaciones de dispersión. Los resultados subrayan la importancia de elegir el tamaño de paso óptimo y el esquema adecuado para minimizar errores en la simulación. En conexión con esto, el trabajo de Guo et al. (2023) muestra cómo las características locales, como las corrientes marinas, afectan la dispersión de contaminantes metálicos y radiactivos, lo que indica que los modelos deben considerar estas variables para representar con precisión la dispersión en diferentes entornos.

Finalmente, el estudio de Sadheesh & Jeyanthi (2023) sobre la variación estacional de los contaminantes atmosféricos resalta cómo factores meteorológicos, como temperatura, velocidad del viento y humedad, afectan la dispersión. Este hallazgo sugiere que las simulaciones deben incorporar variables estacionales para proporcionar predicciones más precisas y relevantes en contextos urbanos.

Conclusiones

La evaluación de los modelos matemáticos y las técnicas de simulación numérica en la dispersión de contaminantes atmosféricos muestra que los modelos de dispersión, como los gaussianos y de caja, son útiles en contextos específicos, pero sus aplicaciones están limitadas por la simplicidad de sus supuestos y la falta de resolución espacial detallada. Tales modelos son adecuados para evaluaciones preliminares y escenarios homogéneos, pero no capturan la complejidad de la dinámica del aire en entornos más variables, como los urbanos e industriales.

En contraste, los modelos de dinámica de fluidos computacional (CFD), incluidos los enfoques de turbulencia RANS y LES, brindan una mayor resolución espacial y una capacidad mejorada para representar la complejidad del entorno. Sin embargo, su alta



demanda computacional y la necesidad de datos precisos representan desafíos significativos. Los modelos CFD, al integrar detalles finos del entorno como la topografía y la geometría, mejoran la precisión de las simulaciones, aunque requieren considerablemente más recursos y tiempo de cálculo.

Las limitaciones de los modelos se evidencian en la necesidad de calibración y validación continua. Los errores en la predicción de la concentración de contaminantes, como la subestimación en áreas urbanas y la influencia de parámetros específicos como la altura de la chimenea, destacan la importancia de ajustar los modelos con datos empíricos para mejorar su precisión.

Además, los factores ambientales como la topografía, la meteorología y la hidrología tienen una influencia significativa en la dispersión de contaminantes. La topografía y las condiciones meteorológicas, como la velocidad del viento y la humedad, afectan la dispersión de manera notable, por lo que, estos factores deben ser integrados en los modelos para reflejar adecuadamente las variaciones estacionales y las condiciones locales. Asimismo, las características específicas del entorno, como las corrientes marinas, deben ser consideradas para una simulación precisa.

En conclusión, la efectividad de los modelos matemáticos y las técnicas de simulación numérica en la dispersión de contaminantes está condicionada por su capacidad para capturar la complejidad del entorno y la influencia de factores ambientales. La integración de técnicas avanzadas como CFD puede mejorar significativamente la precisión de las simulaciones, pero es necesario considerar las limitaciones en términos de cálculo y datos. La consideración de factores ambientales y la calibración continua son esenciales para lograr predicciones más precisas y desarrollar estrategias efectivas de mitigación y gestión de la calidad del aire.

Referencias Bibliográficas

- Bowen, H., & Rongliang, C. (2024). Simulación de alta resolución de la dispersión de contaminantes de campo cercano en una comunidad de centrales nucleares con computación de alto rendimiento. *Revista de Física Matemática No Lineal*, 31(6), 1-20. <https://doi.org/10.1007/s44198-024-00171-7>
- Fernández, V., Álvarez, E. B., & Ackermann, T. (2023). Modelo CFD para estudiar la dispersión de PM en espacios abiertos a gran escala. *Scientific Reports*, 13. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-33144-9>
- Guo, X., Liu, Y.-., Z., Chen, S., Li, S., & Hu, Z. (2023). Análisis de simulación de la dispersión de contaminantes marinos típicos por fusión de múltiples procesos. *Sostenibilidad*, 15(13), 10547-10547. <https://doi.org/10.3390/su151310547>
- Huillier, D. (2021). Una visión general del modelado de dispersión lagrangiana de partículas pesadas en turbulencia isotrópica homogénea y consideraciones sobre las simulaciones de LES relacionadas. *Fluidos*, 6(4), 145. <https://doi.org/10.3390/fluids6040145>



- Jejenywa, O., Gidey, H., & Appadu, A. (2022). Modelación Numérica del Transporte de Contaminantes: Resultados y Parámetros Óptimos. *Simetría*, 14(12), 1-27. <https://doi.org/10.3390/sym14122616>
- Johnson, J. (2022). Introducción a la modelización de la dispersión de contaminantes atmosféricos. *Medio Ambiente. Sci. Proc.*, 19(1), 1-14. <https://doi.org/10.3390/ecas2022-12826>
- Kafle, J., Adhikari, K., Prasad, E., & Rai, R. (2024). Modelación Matemática de la Dispersión de Contaminantes en la Atmósfera. *Revista de la Sociedad Matemática de Nepal (Nepal Journals Online)*, 7(1), 61-70. <https://doi.org/10.3126/jnms.v7i1.67487>
- Lavtižar, K., & Fikfak, A. (2023). Dispersión de contaminantes de tráfico en el entorno construido. *Prostor : revista científica de arquitectura y urbanismo*, 31(1), 2023. [https://doi.org/10.31522/p.31.1\(65\).3](https://doi.org/10.31522/p.31.1(65).3)
- Liang, M., Chao, Y., Tu, Y., & Xu, T. (2023). Dispersión de contaminantes vehiculares en el entorno atmosférico urbano: una revisión del mecanismo, el modelado y la aplicación. *Atmósfera*, 14(2), 279. <https://doi.org/10.3390/atmos14020279>
- Manzur, M., Benzal, G., & González, S. (2013). Modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos. *Actas 7mo Congreso de Medio Ambiente AUGM*, 1-19. <http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/26838>
- Modi, M., Ramachandra, V., Ahmed, L., & Hussain, Z. (2013). Revisión de los modelos teóricos de dispersión de contaminantes atmosféricos. *Revista Internacional De Ciencias Farmacéuticas, Químicas Y Biológicas*, 3(4), 1224-1230.
- Pantusheva, M., Mitkov, R., Hristov, P., & Petrova, D. (2022). Modelización de la dispersión de la contaminación atmosférica en el entorno urbano mediante CFD: una revisión sistemática. *Atmósfera*, 13(10), 1-35. <https://doi.org/10.3390/atmos13101640>
- Rojano, R., Mendoza, Y., Arregoces, H., & Restrepo, G. (2016). Dispersión de Contaminantes del Aire (PM10, NO2, CO, COV y HAP) emitidos desde una Estación Modular de Compresión, Tratamiento y Medición de Gas Natural. *Información tecnológica*, 27(5), 99-110. <https://doi.org/10.4067/S0718-07642016000500012>
- especialización, Universidad Militar Nueva Granada. <http://hdl.handle.net/10654/6613>
- Stockie, J. (2011). Las matemáticas de Modelado de dispersión atmosférica. *Sociedad de Matemática Industrial y Aplicada SIAM*, 53(2), 349-372. <https://doi.org/10.1137/10080991X>
- Temirbekov, N., Temirbekov, A., Kasenov, S., & Tamabay, D. (2024). Modelado numérico para mejorar la predicción del transporte de contaminantes en el aire atmosférico industrial. *Revista Internacional de Diseño y Naturaleza*, 19(3), 917-926. <https://doi.org/10.18280/ij dne.190321>

Conflicto de intereses:

Los autores declaran que no existe conflicto de interés posible.

Financiamiento:

No existió asistencia financiera de partes externas al presente artículo.

Agradecimiento:

N/A

Nota:

El artículo no es producto de una publicación anterior.

