

Enseñanza de química atmosférica mediante modelado computacional interactivo: Una aproximación innovadora con JupyterHub, JupyterLab y BOXMOX

Teaching Atmospheric Chemistry through Interactive Computational Modeling: An Innovative Approach with JupyterHub, JupyterLab, and BOXMOX

José Agustín García Reynoso¹, Verónica Itzael Mejía López², Oscar Augusto Peralta Rosales¹, Pedro Damián Cruz Santiago¹ y Faviola Altuzar Villatoro¹

Resumen

Este artículo presenta una metodología innovadora para la enseñanza de la química atmosférica en licenciatura mediante modelación computacional interactiva. Usando herramientas como JupyterHub/JupyterLab, BOXMOX y scripts en AWK/Python, los estudiantes simulan escenarios de emisiones urbanas y variaciones meteorológicas para analizar la formación de ozono troposférico, el rol de los óxidos de nitrógeno (NOx) y su interacción con compuestos orgánicos volátiles (COV). Los ejercicios consideran cambios tanto en las emisiones como en las condiciones meteorológicas, con el fin de analizar la sensibilidad del ozono frente a estos factores. Los estudiantes aplican las herramientas computacionales y presentan los resultados de las simulaciones, generando discusiones grupales que refuerzan sus conocimientos teóricos. La metodología evidencia que las herramientas computacionales accesibles fomentan un aprendizaje activo, desarrollan pensamiento computacional, abordan problemas reales como la contaminación urbana, y facilitan la autoevaluación y el análisis colaborativo. Implementada en la licenciatura en Ciencias de la Tierra, esta propuesta prepara a los estudiantes para enfrentar desafíos ambientales con rigor científico y el uso de tecnologías modernas.

Palabras clave: química, atmosférica, modelación, computacional, educación.

Abstract

This article presents an innovative methodology for teaching atmospheric chemistry at the undergraduate level through interactive computational modeling. Using tools such as JupyterHub/JupyterLab, BOXMOX, and AWK/Python scripts, students simulate urban emission scenarios and meteorological variations to analyze tropospheric ozone formation, the role of nitrogen oxides (NOx), and their interaction with volatile organic compounds (VOCs). The exercises consider changes in both emissions and meteorological conditions to assess ozone sensitivity to these factors. Students apply computational tools and present simulation results, fostering group discussions that reinforce theoretical knowledge. The methodology demonstrates that accessible computational tools promote active learning, develop computational thinking, address real-world problems such as urban pollution, and facilitate self-assessment and collaborative analysis. Implemented in the Bachelor's program in Earth Sciences, this approach prepares students to tackle environmental challenges with scientific rigor and modern technologies.

Keywords : chemistry, atmospheric, modeling, computational, education.

CÓMO CITAR:

García Reynoso, J. A., Mejía López, V. I., Peralta Rosales, O. A., Cruz Santiago, P. D., y Altuzar Villatoro, F. (2025, octubre-diciembre). Enseñanza de química atmosférica mediante modelado computacional interactivo: Una aproximación innovadora con JupyterHub, JupyterLab y BOXMOX. *Educación Química*, 36(4). <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2025.4.91115>

¹ Instituto de Ciencias de la Atmósfera y Cambio Climático, Universidad Nacional Autónoma de México, México.

² Escuela Nacional de Ciencias Biológicas Unidad Zacatenco, Instituto Politécnico Nacional México, México.

Introducción

La comprensión de los procesos químicos en la atmósfera, particularmente aquellos vinculados a la formación y degradación del ozono, es fundamental para abordar los problemas ambientales como la contaminación del aire y sus efectos en la salud pública y los ecosistemas (Seinfeld y Pandis, 2016). En la estratosfera, el ozono actúa como un escudo protector contra la radiación ultravioleta (Farman et al., 1985); sin embargo, en la troposfera su acumulación se asocia con los fenómenos de smog fotoquímico, impactando directamente la calidad del aire (Jacob, 2025). Este equilibrio dinámico está influenciado por los compuestos como los óxidos de nitrógeno (NO_x) y por los compuestos orgánicos volátiles que participan en las reacciones cíclicas de la producción y el consumo del ozono bajo condiciones específicas de la luz solar (Atkinson, 2000).

Pasos	Desarrollo
1. Reacciones químicas	<p>Reacción 1: $\text{NO}_2 + h\nu \rightarrow \text{NO} + \text{O}$. (J, constante de fotólisis)</p> <p>Reacción 2: $\text{O} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}_3$ (k_1, constante de reacción 1)</p> <p>Reacción 3: $\text{O}_3 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_2$. ($k_2$, constante de reacción 2)</p>
2. Ecuaciones diferenciales	$\frac{d[\text{NO}_2]}{dt} = -J[\text{NO}_2] + k_2[\text{NO}][\text{O}_3]$ $\frac{d[\text{NO}]}{dt} = +J[\text{NO}_2] - k_2[\text{NO}][\text{O}_3]$ $\frac{d[\text{O}_3]}{dt} = +k_1[\text{O}][\text{O}_2] - k_2[\text{NO}][\text{O}_3]$ <p>se considera al [O] constante en este caso $d[\text{O}]/dt=0$.</p>
3. Código en Fortran del jacobiano	<pre> subroutine jacobian(t, y, Jmat) implicit none real(kind=8), intent(in) :: t real(kind=8), intent(in) :: y(3) ! y(1)=NO2, y(2)=NO, y(3)=O3 real(kind=8), intent(out) :: Jmat(3,3) real(kind=8) :: J, k1, k2 ! Definición de constantes de reacción (ejemplos) J = 1.0e-3 ! fotólisis s^-1 k1 = 1.0e-12 ! formación de ozono. cm3/molec/s k2 = 1.5e-12 ! destrucción de ozono por NO cm3/ molec/s ! Cálculo del Jacobiano Jmat(1,1) = -J Jmat(1,2) = k2 * y(3) Jmat(1,3) = k2 * y(2) Jmat(2,1) = J Jmat(2,2) = -k2 * y(3) Jmat(2,3) = -k2 * y(2) Jmat(3,1) = 0.0 Jmat(3,2) = -k2 * y(3) Jmat(3,3) = -k2 * y(2) end subroutine jacobian </pre>

TABLA 1. Esquema simplificado de la fotoquímica del NO₂ y su modelado.

El estudio de los mecanismos químicos atmosféricos requiere un enfoque cuantitativo, donde las reacciones descritas teóricamente se traduzcan en sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO), proceso que se muestra en la Tabla 1. Estas ecuaciones, derivadas de la estequiometría y las constantes cinéticas, permiten modelar la evolución temporal de las concentraciones de especies químicas (Finlayson-Pitts y Pitts Jr, 1999). Tradicionalmente, este proceso demanda un manejo avanzado de herramientas computacionales (Brasseur y Jacob, 2017), pero en la actualidad, plataformas como BOXMOX —extensión del *Kinetic PreProcessor (KPP)* (Damian et al., 2002)— permiten generar simulaciones en modelos de caja, automatizando la conversión de los mecanismos químicos definidos en archivos de texto legibles por humanos a código computacional optimizado en diversos lenguajes de programación (como C, Fortran o MATLAB). El KPP genera rutinas eficientes para calcular las tasas de cambio de las especies químicas, posibilitando la integración numérica de sistemas desde mecanismos simples hasta altamente complejos, lo que facilita la simulación de procesos atmosféricos detallados.

Entre las principales ventajas del BOXMOX destaca su accesibilidad a través de las interfaces en línea¹ o con JupyterLab, lo que lo convierte en una herramienta adecuada tanto para los estudiantes como para los usuarios sin experiencia avanzada en la programación. Además, permite la simulación de procesos químicos en la troposfera y la estratósfera, con flexibilidad para ajustar las condiciones iniciales, las emisiones, la radiación y los parámetros meteorológicos. Su diseño favorece el análisis didáctico y conceptual, permitiendo explorar la sensibilidad del sistema ante variaciones en emisiones o condiciones ambientales.

No obstante, BOXMOX presenta limitaciones importantes: al tratarse de un modelo unidimensional (modelo de caja), no representa los procesos de transporte horizontal ni vertical, ni considera, por defecto, la deposición seca/húmeda o las reacciones heterogéneas en las superficies de las partículas. También está limitado a escalas temporales relativamente cortas y asume condiciones bien mezcladas, lo que restringe su aplicabilidad directa en los estudios de campo sin validación adicional. A pesar de ello, BOXMOX sigue siendo una herramienta valiosa para la enseñanza, la investigación preliminar y el análisis conceptual de la química atmosférica.

En el ámbito de la educación química, la comprensión de estos procesos atmosféricos y la dispersión de contaminantes es fundamental para abordar los desafíos ambientales contemporáneos (Brasseur et al., 1999). La simulación de experimentos lagrangianos, como el presentado en este estudio, ofrece una herramienta valiosa para explorar cómo las parcelas de aire interactúan con las emisiones urbanas y cómo estos contaminantes se dispersan en la atmósfera (Knote et al., 2015). Este artículo propone un enfoque educativo innovador para analizar el impacto de las emisiones antropogénicas en la química atmosférica utilizando como caso de estudio una parcela de aire que atraviesa una zona urbana. Mediante los ejercicios prácticos implementados en JupyterLab —entorno interactivo que combina código, visualizaciones y narrativa (Jupyter, 2024; Kluyver et al., 2016)—, se simula el transporte de la parcela, la inyección de emisiones de NO_x ($\pm 20\%$) y su influencia en las concentraciones de ozono (O₃) y en los productos de terminación de cadena como el peróxido de hidrógeno (H₂O₂) y el ácido nítrico (HNO₃). Asimismo, es posible graficar otras especies químicas relevantes como el nitrato de peroxiacetilo (PAN), el radical hidroxilo (OH) y el hidroperoxilo (HO₂), entre más de 80 especies calculadas mediante el mecanismo químico MOZART-4.

¹ <https://mbees.med.uni-augsburg.de/boxmodeling/index.html>

El experimento descrito simula el viaje de una parcela de aire sobre una ciudad, capturando las emisiones durante un período específico y luego desplazándose con el viento. Este enfoque permite analizar cómo las concentraciones de fondo se ven afectadas por las emisiones urbanas y cómo los procesos de fotólisis y depósito influyen en la composición química de la atmósfera (Sillman y He, 2002). La simulación se realiza en un modelo de “caja” que representa una capa límite bien mezclada, proporcionando una visión simplificada pero efectiva de los procesos que ocurren en la atmósfera urbana (Emmons et al., 2010). La integración de herramientas como Python —con bibliotecas como *Pandas* para el manejo de datos (McKinney, 2015) y *Matplotlib* para visualización (Ari y Ustazhanov, 2014)—, junto con la accesibilidad de JupyterHub para entornos colaborativos (Granger y Pérez, 2021; Jupyter, 2024; Kluyver et al., 2016), permite el acceso a modelos químicos avanzados.

Este trabajo presenta los detalles técnicos de la simulación y destaca la importancia de la educación química en la formación de profesionales capaces de entender y mitigar los impactos ambientales (Council, 2012). A través de la implementación de experimentos como éste, los estudiantes pueden adquirir una comprensión más profunda de los mecanismos químicos que gobiernan la calidad del aire y cómo estos pueden ser modelados y analizados (Wesely y Hicks, 2000). En las siguientes secciones, se detallan los procedimientos empleados, incluyendo la configuración del modelo, la inyección de emisiones y la ejecución de experimentos con variaciones en las emisiones de NO_x. Además, se discuten los resultados obtenidos y su relevancia en el contexto educativo, demostrando cómo este tipo de simulaciones puede integrarse en los planes de estudio para fomentar un aprendizaje activo y aplicado (Prince, 2004).

Este artículo busca ilustrar, mediante un caso práctico y herramientas modernas, cómo la modelación química contribuye a entender y mitigar los desafíos de la contaminación atmosférica. Al combinar fundamentos teóricos con aplicaciones computacionales accesibles se promueve la formación de una nueva generación de químicos comprometidos con la sostenibilidad ambiental, capacitados tanto con conocimientos técnicos como con habilidades para enfrentar problemas reales desde un enfoque interdisciplinario (Hidalgo et al., 2024).

Contexto pedagógico y fundamentación teórica

La enseñanza de la química como un sistema dinámico permite comprender que la evolución temporal de los compuestos atmosféricos puede predecirse con cierto grado de dificultad, esto debido a las interacciones múltiples entre las variables y los factores ambientales. Las reacciones químicas en el ambiente, como las que forman y destruyen el ozono, dependen de factores como la temperatura, la presión, la radiación solar, la concentración de precursores y la presencia de especies catalíticas (Villarejo, 2013). Estas condiciones generan un sistema complejo, estructurado, pero con comportamientos caóticos, donde además intervienen los mecanismos de retroalimentación y las interacciones con partículas y otros elementos del entorno. Debido a que esta red no sigue relaciones proporcionales ni es fácilmente predecible mediante ecuaciones analíticas, se requieren modelos numéricos avanzados. Por ello, al integrar herramientas computacionales en la enseñanza de la química permite explorar estos fenómenos de forma virtual, fomentando el aprendizaje activo y el desarrollo de las habilidades técnicas (Hidalgo et al., 2024; Meroni et al., 2015). En este

estudio se adopta el enfoque de química en contexto (Meroni et al., 2015), integrando los fenómenos atmosféricos con herramientas de modelación numérica accesibles como BOXMOX (Knote et al., 2015; NCAR, 2015). Esta vinculación permite analizar la evolución de los contaminantes atmosféricos considerando que sus concentraciones no siguen un comportamiento lineal, sino que resultan de la interacción compleja entre las emisiones, las condiciones meteorológicas y otras variables ambientales. El uso de modelos simplificados facilita la comprensión de estos procesos y su aplicabilidad en contextos educativos.

Material es y métodos

Como estrategia metodológica, este estudio empleó un enfoque de Aprendizaje Basado en Problemas (ABP) integrado y combinando las herramientas computacionales que le permiten al alumno interactuar con la interfase de JupyterHub y JupyterLab a través de cuadernos con texto y código para resolver problemas reales a través de los ejercicios que simulan la pluma de emisión de una ciudad. Para la simulación de la pluma se emplea el programa “BOXMOX”, el cual se ejecuta mediante JupyterLab dentro de un cuaderno de trabajo. Posterior a la simulación se generan los gráficos de las variables de interés. En la Figura 1 se sintetiza la estructura del curso introductorio en modelado atmosférico, diseñado para que los estudiantes desarrollen competencias técnicas y analíticas mediante herramientas computacionales especializadas.

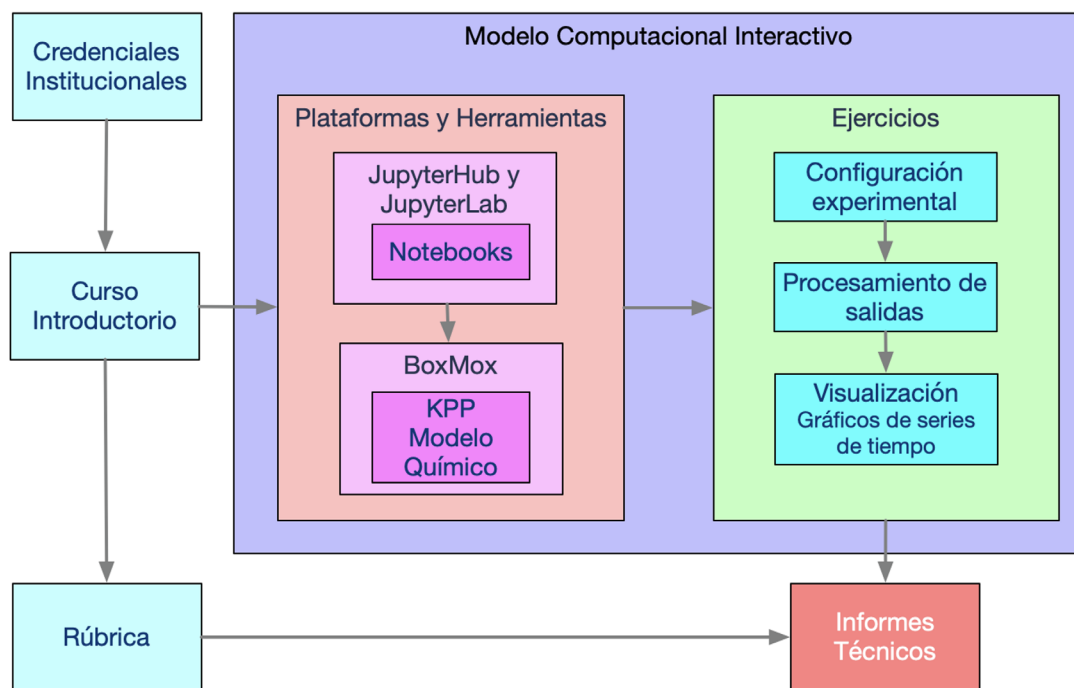


FIGURA 1. Modelo Computacional Interactivo: Uso Didáctico.

Plataformas y herramientas

Se emplearon herramientas de modelación química computacional para simular los procesos atmosféricos y estudiar la transformación de contaminantes en plumas de emisión urbana mediante entornos interactivos.

a) Jupyterhub y JupyterLab

El JupyterHub permite el acceso simultáneo de múltiples usuarios a cuadernos interactivos (notebooks) en la nube, sin demandar recursos locales significativos. Desde esta plataforma, se accede a JupyterLab, donde los usuarios escriben código, ajustan parámetros y visualizan resultados en tiempo real (Jupyter, 2024)). Los notebooks integran gráficos interactivos y texto explicativo (Kluyver et al., 2016), utilizando diversos lenguajes según el kernel instalado.

b) BOXMOX

El BOXMOX (Knote et al., 2015; NCAR, 2015) modela la química atmosférica en una caja. Convierte mecanismos químicos en ecuaciones diferenciales mediante el preprocesador KPP, resolviéndolas con condiciones iniciales definidas por el usuario (temperatura, presión, concentraciones, emisiones). Incluye códigos en R para visualización.

Se empleó localmente, evitando los problemas de recursos en línea (Knote, 2022) accediendo desde JupyterHub. Incluye el mecanismo MOZART-4 (Emmons et al., 2010), para plumas urbanas, generando el ejecutable MOZART_4.exe durante su instalación.

Configuración experimental

Los alumnos desarrollan competencias en la simulación de emisiones urbanas mediante:

Acceso y capacitación

- Capacitación inicial en la contaminación atmosférica y en los efectos del ozono en Ciudad de México (recursos en: <https://uapa.cuaed.unam.mx/node/1264>).
- Actividades introductorias en JupyterHub para manipular los archivos de BOXMOX y ejecutar los scripts.
- Acceso mediante las credenciales institucionales proporcionadas por un administrador

Procesamiento y visualización

En JupyterLab, los alumnos:

1. Ejecutan los códigos y modifican los archivos de entrada del BOXMOX (e.g., Environment.csv, Emissions.csv).
2. Visualizan los resultados (series temporales de O_3 , NO_x , HCHO, H_2O_2 , HNO_3) mediante gráficos generados con Python (Pandas (McKinney, 2015) y Matplotlib (Ari y Ustazhanov, 2014)) .
3. Analizan los efectos de los cambios en parámetros, reforzando el aprendizaje práctico.

Ejercicios

Emisiones (sensibilidad química del O_3 a NO_x):

Caso 1: Simulación con las emisiones base.

Caso 2: Incremento del 20% en NO y NO₂ en las emisiones (modificación de archivos de entrada mediante el script en AWK).

Caso 3: Decremento del 20% en las emisiones.

Caso 4: Decremento del 50% (análisis de no linealidades en la química del ozono).

Meteorología (sensibilidad a las condiciones ambientales):

Caso 5: Capa límite planetaria (PBL) base (1000 m).

Caso 6: PBL = 500 m (mayor concentración).

Caso 7: PBL = 2000 m (dilución).

Caso 8: Temperatura ambiente +2°C (efecto en reacciones).

Caso 9: Temperatura ambiente -2°C (estabilidad de compuestos).

Evaluación del aprendizaje

Para conocer la contribución al aprendizaje del alumno se utilizan distintas rúbricas de competencia a través de los cuestionarios de autoevaluación dentro del cuaderno y se realizan los informes técnicos con los gráficos elaborados en los diversos casos (exportados como PDF desde JupyterLab). Se evalúan los siguientes aspectos:

- **Técnica:** Manipulación del script AWK y el análisis de las salidas del BOXMOX.
- **Conceptual:** Interpretación de los resultados (e.g., correlación entre PBL y concentración de contaminantes).
- **Colaborativa:** Discusión grupal de los escenarios en foros integrados en JupyterHub (Griebeler et al.; Meroni et al., 2015).

a) Tabla Resumen de Rúbricas para la Evaluación Integral

Aspecto Técnico (40 puntos)

Criterio	Excelente (36-40 pts)	Adecuado (26-35 pts)	Insuficiente (0-25 pts)
Manipulación de los scripts AWK	Modifica eficientemente Emissions.csv para los 4 casos, aplicando cambios de $\pm 20\%/50\%$ sin errores.	Modificaciones con errores menores que no afectan los resultados.	Errores graves en los scripts que invalidan las simulaciones.
Análisis de las salidas del BOXMOX	Extrae y procesa datos clave (máximos, tiempos) de todos los contaminantes con precisión.	Omite 1-2 variables o comete errores de cálculo menores.	No logra extraer datos relevantes o comete errores sistemáticos.

Aspecto Conceptual (40 puntos)

Criterio	Excelente (36-40 pts)	Adecuado (26-35 pts)	Insuficiente (0-25 pts)
Interpretación de los resultados	Explica las correlaciones (ej: PBL vs concentración) y las no linealidades del ozono con evidencia sólida.	Identifica los patrones básicos sin profundizar en las causas químicas.	Conclusiones superficiales o desconectadas de los datos.
Análisis comparativo	Relaciona variaciones de $\text{CH}_2\text{O}/\text{H}_2\text{O}_2/\text{PAN}$ con el ozono usando mecanismos químicos (ej: formación de PAN).	Describe los cambios sin vincularlos a los procesos químicos.	No establece las relaciones entre los contaminantes.

Aspecto Colaborativo (20 puntos)

Criterio	Excelente (18-20 pts)	Adecuado (12-17 pts)	Insuficiente (0-11 pts)
Participación en los foros	3+ intervenciones sustanciales que integran los datos, citan literatura y guían discusiones.	1-2 aportes relevantes pero sin fundamentar con evidencia.	Intervenciones esporádicas o irrelevantes.
Trabajo grupal	Sintetiza sus contribuciones, media conflictos y documenta los acuerdos.	Colabora pasivamente sin liderar iniciativas.	No interactúa o desconoce las dinámicas grupales.

Ponderaciones Totales

Aspecto	Puntos	Escala
Técnico	40	Dominio herramientas computacionales.
Conceptual	40	Profundidad en análisis químico-atmosférico.
Colaborativo	20	Calidad de interacción en entornos digitales.
TOTAL	100	Escala final: 90-100 (Excelente) · 70-89 (Bueno) · 50-69 (Aceptable) · <50 (Insuficiente)

b) Claves de Evaluación

1. Evidencias requeridas:

- Técnico: Scripts AWK modificados, capturas de ejecución BOXMOX.
- Conceptual: Gráficos comparativos con anotaciones, tablas de resultados.
- Colaborativo: Historial de los foros con contribuciones etiquetadas.

2. Referencias obligatorias:

- Plataformas: JupyterHub (Kluyver et al., 2016), BOXMOX (Knote et al., 2015).
- Colaboración: Modelos de foros (Meroni et al., 2015), aprendizaje grupal (Griebeler et al.).

Resultados

Este ejercicio se aplicó como actividad optativa a un grupo de estudiantes de Ciencias de la Tierra en la materia de Química Atmosférica (clave 0314), 40% realizó el ejercicio, para la evaluación técnica todos realizaron las actividades de cambio de emisiones donde pudieron acceder a la plataforma, realizar las simulaciones y generar las gráficas, como punto adicional se propuso la sección de influencia de la meteorología y 33% realizó las actividades. En cuanto a la evaluación conceptual de la evaluación de los resultados, 33% de los alumnos dieron una interpretación a los resultados del cambio de emisiones. Durante la discusión grupal, se observó que las concentraciones de ozono (O_3) presentaban diferencias mínimas entre los distintos escenarios de emisiones evaluados. Este comentario motivó un análisis enfocado en la no linealidad de la relación entre el O_3 y sus precursores (NO_x y COV), lo que llevó en grupo a retomar y profundizar en la interpretación del diagrama EKMA (Environmental Kinetic Modeling Approach) (Gipson et al., 1980) presentado en la información introductoria.

Tras analizar los resultados y las entrevistas con el grupo piloto, se evidenció la necesidad de incluir en las instrucciones ejercicios de reflexión guiada mediante preguntas clave, directamente asociadas a los hallazgos de las simulaciones. Se observó que los estudiantes requieren conocimientos previos de pensamiento computacional (Vásquez Acevedo et al., 2023) y de programación para facilitar la comprensión de los procesos.

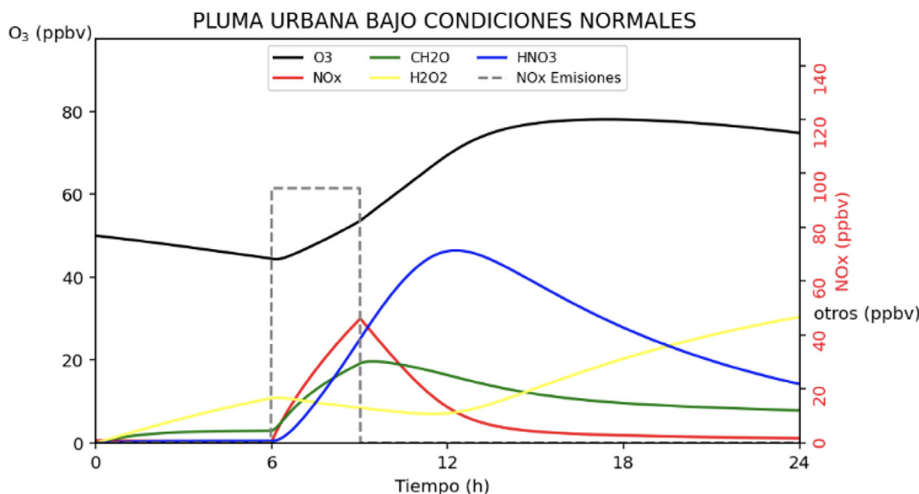


FIGURA 2. Simulación de Evolución de Contaminantes.

La Figura 2 es una de las imágenes generadas mediante la aplicación del proceso descrito en el cuaderno de JupyterLab, utilizando herramientas de programación en Python, en ésta se muestra la evolución temporal de las concentraciones de ozono (O_3), óxidos de nitrógeno (NO_x), formaldehído (CH_2O), ácido nítrico (HNO_3) y peróxido de hidrógeno (H_2O_2) en una parcela de aire bajo las siguientes condiciones: temperatura constante: $18^\circ C$, altura de capa límite (PBL): 1000 m, emisiones base (contaminantes primarios inyectados entre 6:00 y 9:00 h). Durante la fase de emisión (6:00–9:00 h), se observa un incremento en las concentraciones de NO_x , CH_2O y HNO_3 debido a la inyección de contaminantes primarios, mientras que el H_2O_2 disminuye ligeramente por su consumo en reacciones de oxidación. En la fase fotoquímica (9:00–14:00 h), los NO_x disminuyen al participar en la formación de O_3 y HNO_3 , el ozono alcanza su máximo hacia el mediodía por la fotólisis de NO_2 , y el H_2O_2 comienza a aumentar tras las 12:00 h por la acumulación de radicales HO_2 . Finalmente, en la fase de decaimiento (después de las 14:00 h), las concentraciones de O_3 y CH_2O disminuyen progresivamente debido al agotamiento de los precursores y la falta de nuevas emisiones, reflejando los procesos de oxidación y de dilución en la atmósfera. Este comportamiento ilustra los mecanismos clave de la química atmosférica urbana bajo condiciones controladas.

Discusión

El uso de tecnologías computacionales en la enseñanza de la química atmosférica ofrece ventajas múltiples, que ayudan a optimizar el proceso de aprendizaje y facilitan la modelización de fenómenos complejos. No obstante, su integración presenta desafíos significativos según los testimonios de algunos estudiantes, dado que se requiere de conocimientos básicos en programación y manejo de software especializado como lo es la programación en Python que consta de sintaxis básica, el manejo de librerías comunes como NumPy, Pandas y Matplotlib, así como la ejecución de códigos en AWK y las instrucciones de los cuadernos interactivos dentro de JupyterLab entre otros más.

Durante este proceso se incentiva al alumno a ampliar su panorama en la búsqueda de información. Además, si bien estos modelos proporcionan resultados robustos, su correcta interpretación exige una comprensión de los principios fundamentales de la química atmosférica, por lo que el alumno interactúa con las diferentes variables de los ejercicios asignados, fomentando así la construcción activa del conocimiento.

Este enfoque donde se combina el modelado científico avanzado con interfaces accesibles amplía el acceso a herramientas profesionales en educación superior. La reproducibilidad de los experimentos mediante cuadernos de trabajo interactivos y compartibles, así como la adaptabilidad a contextos locales (e.g., contaminación urbana) lo convierten en un recurso versátil (Meróni et al., 2015). Además, la integración de JupyterHub fomenta un aprendizaje activo, donde los estudiantes no solo buscan información, sino que diseñan y validan hipótesis mediante simulaciones numéricas, preparándolos para desafíos interdisciplinarios en sostenibilidad ambiental.

Conclusión

Este artículo propone una metodología innovadora para la enseñanza de la química atmosférica mediante herramientas computacionales interactivas, integrando plataformas como JupyterHub/JupyterLab, BOXMOX y empleando scripts en AWK y Python. El enfoque

busca que estudiantes de licenciatura/posgrado desarrollen habilidades técnicas y comprendan las dinámicas ambientales complejas, como la formación y degradación del ozono troposférico, la influencia de los óxidos de nitrógeno (NO_x) y la interacción con compuestos orgánicos volátiles (COV).

La implementación de los ejercicios prácticos, como la simulación de una pluma urbana con variaciones en las emisiones ($\pm 20\%$, -50%) y las condiciones meteorológicas (altura de la capa límite planetaria y temperatura) permitió a los estudiantes explorar relaciones no lineales en la química del ozono. Por ejemplo, se observó que los cambios en las emisiones de NO_x no siempre generan variaciones proporcionales en las concentraciones de O₃, lo que motivó discusiones grupales sobre el diagrama EKMA y la sensibilidad química de la atmósfera y con ello reafirmar el conocimiento en el tema.

Estas herramientas transforman los desafíos técnicos en oportunidades de aprendizaje significativo: los estudiantes no solo dominan software especializado (BOXMOX/Jupyter), sino que desarrollan una comprensión profunda de los fenómenos atmosféricos mientras adquieren habilidades críticas para enfrentar los problemas relacionados con la contaminación atmosférica.

En este caso su éxito depende de equilibrar el desarrollo técnico con la profundización conceptual. La experiencia resalta el potencial de las herramientas empleadas para generalizar el acceso al estudio de la química atmosférica aplicada, siempre que se acompañen con fundamentos teóricos que guíe a los estudiantes en la interpretación significativa de los datos.

Agradecimientos

A los integrantes de la unidad de cómputo y supercómputo del Instituto de Ciencias de la Atmósfera y Cambio Climático por el apoyo en la configuración e instalación de JupyterHub, Jupyter lab, la configuración y compilación del BOXMOX en el cluster del Instituto. Al proyecto PAPIIME PE105424 "Fortalecimiento educativo en ciencias de la tierra: integración de tecnologías y recursos interactivos para mejorar la formación y el impacto"

Referencias:

- Ari, N., y Ustazhanov, M. (2014). Matplotlib in python. 2014 11th International Conference on Electronics, Computer and Computation (ICECCO),
- Atkinson, R. (2000). Atmospheric chemistry of VOCs and NO_x. *Atmospheric Environment*, 34(12), 2063-2101. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(99\)00460-4](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(99)00460-4)
- Brasseur, G. P., y Jacob, D. J. (2017). *Modeling of atmospheric chemistry*. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/9781316544754>
- Brasseur, G. P., Orlando, J. J., y Tyndall, G. S. (1999). *Atmospheric chemistry and global change* (Vol. 654). Oxford university press New York.
- Council, N. R. (2012). A framework for K-12 science education: Practices, crosscutting concepts, and core ideas. *National Academy of Sciences*.

- Damian, V., Sandu, A., Damian, M., Potra, F., y Carmichael, G. R. (2002). The kinetic preprocessor KPP-a software environment for solving chemical kinetics. *Computers & Chemical Engineering*, 26(11), 1567-1579.
- Emmons, L. K., Walters, S., Hess, P. G., Lamarque, J.-F., Pfister, G. G., Fillmore, D.,...Laepfle, T. (2010). Description and evaluation of the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4). *Geoscientific Model Development*, 3(1), 43-67.
- Farman, J. C., Gardiner, B. G., y Shanklin, J. D. (1985). Large losses of total ozone in Antarctica reveal seasonal ClO_x/NO_x interaction. *Nature*, 315(6016), 207-210.
- Finlayson-Pitts, B. J., y Pitts Jr, J. N. (1999). *Chemistry of the upper and lower atmosphere: theory, experiments, and applications*. Elsevier.
- Gipson, G., Freas, W., Kelly, R., y Meyer, E. (1980). *Guideline for use of city-specific EKMA in preparing ozone SIPs. Draft report* (PB-81-118739). EPA. <https://www.osti.gov/biblio/6424732>
- Granger, B. E., y Pérez, F. (2021). Jupyter: Thinking and storytelling with code and data. *Computing in Science & Engineering*, 23(2), 7-14.
- Griebeler, C. H., Passos, C. G., y Pazinato, M. S. Peer instruction in chemistry classes: systematic review on contributions and possibilities. *Educación Química*, 35(4), 108-126.
- Hidalgo, J. F. R., Atariguana, E. E. C., Yungan, J. A. C., y Rodríguez, S. H. T. (2024). Métodos Educativos Innovadores para la Enseñanza de Química. *Polo del Conocimiento*, 9(6), 224-239.
- Jacob, D. J. (2025). *Introduction to Atmospheric Chemistry* (2nd ed.). Princeton University Press.
- Jupyter, P. (2024). *Jupyter: Open source, interactive computing*. <https://jupyter.org>
- Kluyver, T., Ragan-Kelley, B., Pérez, F., Granger, B., Bussonnier, M., Frederic, J.,...Corlay, S. (2016). Jupyter development team. Jupyter notebooks. *a publishing format for reproducible computational workflows*. In *ELPUB*, 16, 87-90.
- Knote, C. (2022). *Run BOXMOX experiments online*. Medizinische Biophysik, Bioengineering und Systemtheorie, Universität. Retrieved 12/01/2025 from https://mbees.med.uni-augsburg.de/boxmodeling/run_online.html
- Knote, C., Tuccella, P., Curci, G., Emmons, L., Orlando, J. J., Madronich, S.,...Zhang, Y. (2015). Influence of the choice of gas-phase mechanism on predictions of key gaseous pollutants during the AQMEII phase-2 intercomparison. *Atmospheric Environment*, 115, 553-568. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.11.066>
- McKinney, W. (2015). Pandas, python data analysis library. URL <http://pandas.pydata.org>, 3-15.
- Meroni, G., Copello, M. I., y Paredes, J. (2015). Enseñar química en contexto. Una dimensión de la innovación didáctica en educación secundaria. *Educación química*, 26(4), 275-280.

- NCAR. (2015). *BOXMOX - box model extensions to KPP*. U.S. National Science Foundation. <https://www2.acom.ucar.edu/modeling/boxmox-box-model-extensions-kpp>
- Prince, M. (2004). Does active learning work? A review of the research. *Journal of engineering education*, 93(3), 223-231.
- Seinfeld, J. H., y Pandis, S. N. (2016). *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change* (3rd ed.). John Wiley & Sons.
- Sillman, S., y He, D. (2002). Some theoretical results concerning O_3 - NO_x -VOC chemistry and NO_x -VOC indicators. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 107(D22), ACH 26-21-ACH 26-15. <https://doi.org/10.1029/2001JD001123>
- Villarejo, A. L. D. (2013). *NO_x COV y CFC: química de formación y destrucción del ozono atmosférico*. Real Academia Nacional de Farmacia.
- Vásquez Acevedo, H. M., Licona Suarez, L. J., y Felizzola Medina, L. D. (2023). Pensamiento Computacional: una competencia del siglo XXI: Revisión sistemática en Scopus. *Revista Latinoamericana Ogmios*, 4(9), 1 - 16. <https://doi.org/10.53595/rlo.v4.i9.090>
- Wesely, M., y Hicks, B. (2000). A review of the current status of knowledge on dry deposition. *Atmospheric environment*, 34(12-14), 2261-2282.