

Simulación de la contaminación del aire en el Área Metropolitana de Buenos Aires con modelos simples y complejos

Andrea Pineda Rojas

Solange Luque

Centro de Investigaciones del Mar y la Atmósfera, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas
pineda@cima.fcen.uba.ar, solange.luque@cima.fcen.uba.ar

Resumen. El modelado de la contaminación atmosférica urbana permite estudiar la interacción entre las concentraciones de contaminantes en el aire, las emisiones y las condiciones atmosféricas, constituyendo una herramienta clave para la investigación y la gestión de la calidad del aire. Este trabajo compara la capacidad de un modelo simple (DAUMOD-GRS) y uno complejo (WRF-CMAQ) para simular concentraciones de dióxido de nitrógeno (NO_2) en el Área Metropolitana de Buenos Aires (AMBA), con el objetivo de analizar su comportamiento bajo diferentes condiciones y explorar la utilidad de herramientas de distinta complejidad en contextos con datos limitados. Los modelos se aplicaron utilizando un inventario de emisiones desarrollado para el AMBA, durante dos meses de invierno y primavera de 2012. Se comparan las concentraciones modeladas con las observadas en tres estaciones de monitoreo, y se analiza la sensibilidad de los modelos a parámetros relevantes. Ambos modelos presentan métricas de desempeño dentro de rangos aceptables. Se observan patrones espaciales similares en los campos medios, aunque DAUMOD-GRS tiende a generar concentraciones de NO_2 más elevadas y gradientes horizontales más marcados que WRF-CMAQ. Futuros análisis de procesos ayudarán a identificar qué aspectos de las formulaciones explican las diferencias observadas entre modelos.

Palabras clave: contaminación del aire, Buenos Aires, modelos de dispersión atmosférica.

Simulation of air pollution in the Metropolitan Area of Buenos Aires with simple and complex models

Abstract. Urban air pollution modelling makes it possible to study the interaction between concentrations of pollutants in the air, emissions and atmospheric conditions, constituting a key tool for air quality research and management. This work compares the capacity of a simple model (DAUMOD-GRS) and a complex model (WRF-CMAQ) to simulate nitrogen dioxide (NO_2) concentrations in the Metropolitan Area of Buenos Aires (AMBA), with the aim of analyzing its behavior under different conditions and exploring the usefulness of tools of different complexity in contexts with limited data. The models were applied using an emissions inventory developed for the AMBA, during two months in winter and spring 2012. The modeled concentrations are compared with those observed at three monitoring stations, and the

sensitivity of the models to relevant parameters is analyzed. Both models present performance metrics within acceptable ranges. Similar spatial patterns are observed in the mid-fields, although DAUMOD-GRS tends to generate higher NO₂ concentrations and sharper horizontal gradients than WRF-CMAQ. Future process analyses will help identify which aspects of the formulations explain the observed differences between models.

Keywords: air pollution, Buenos Aires, atmospheric dispersion models.

1 Introducción

El estudio de la contaminación atmosférica urbana requiere del uso de mediciones de concentraciones en estaciones de superficie y resultados de modelos de calidad de aire (MCA). Estos modelos permiten estimar las concentraciones de contaminantes en el aire, resultantes de la interacción entre las emisiones, las condiciones meteorológicas y las características locales. Los MCA pueden clasificarse en simples y complejos. Los primeros son ampliamente utilizados a nivel regulatorio, ya que permiten realizar simulaciones largas (varios años) con pocos recursos (datos de entrada y tiempo de cómputo), mientras que los modelos complejos incluyen representaciones más detalladas de distintos procesos, pero requieren una mayor cantidad de recursos. Dadas sus ventajas y limitaciones, estudiar y comparar la capacidad de estos modelos para simular concentraciones de contaminantes es fundamental para: (i) comprender el rol de procesos que usualmente no están representados en los modelos más sencillos, y (ii) determinar en qué casos es suficiente el uso de herramientas simples. Aunque existe una larga tradición de estudios de modelado de calidad del aire en ciudades de países desarrollados, las comparaciones sistemáticas entre modelos simples y complejos de escala urbana (e.g., ~1 km de resolución espacial) son escasas (e.g., Liu et al., 2024), y no se han identificado antecedentes en el Área Metropolitana de Buenos Aires (AMBA).

En el AMBA, los estudios sobre contaminación atmosférica han sido tradicionalmente realizados utilizando MCA semi-empíricos simples (modelos de dispersión atmosférica). En la escala urbana, el DAUMOD-GRS (Pineda Rojas y Venegas, 2013) ha mostrado un buen desempeño para estimar las concentraciones horarias de dióxido de nitrógeno (NO₂) en los sitios de monitoreo de la ciudad de Buenos Aires (Pineda Rojas et al., 2022). Asimismo, recientemente se ha implementado en el AMBA un modelo complejo ampliamente utilizado en áreas urbanas (WRF-CMAQ, Byun y Schere, 2006), en alta resolución espacial (Luque et al., 2025). En este trabajo se estudian las capacidades de ambos modelos para estimar la concentración de NO₂ en tres estaciones de monitoreo de calidad del aire del AMBA, en dos meses de 2012 (invierno y primavera), seleccionados para representar condiciones atmosféricas diferentes. Adicionalmente, se analiza la sensibilidad de ambos modelos a cambios en parámetros relevantes para la concentración de NO₂. El objetivo es analizar cómo responden ambos modelos bajo diferentes condiciones atmosféricas y de emisión.

2 Metodología

2.1 Modelos de calidad de aire

DAUMOD-GRS es una extensión del modelo de dispersión atmosférica DAUMOD (Mazzeo y Venegas, 1991), originalmente desarrollado para estimar concentraciones de especies inertes a partir de fuentes areales. Se basa en la ecuación de difusión bidimensional y asume estado estacionario. Para permitir la estimación de NO₂, se incorporó un esquema simplificado de la química entre COVs, NO₂ y O₃ (GRS, Azzi et al., 1992). El modelo ha sido validado utilizando mediciones de concentración de NO₂ y O₃ de múltiples campañas en Buenos Aires, mostrando buen rendimiento en escala horaria (Pineda Rojas, 2014).

WRF-CMAQ es un sistema de modelado que combina un modelo meteorológico (WRF) y un modelo de transporte químico (CMAQ), y permite simular las concentraciones considerando distintos tratamientos de los procesos físico-químicos que determinan la evolución de contaminantes en aire. Esta herramienta se utiliza ampliamente en la escala regional, mientras que su implementación en la escala urbana constituye un desafío debido a que requiere información muy detallada que a menudo no está disponible. Una descripción detallada de la configuración utilizada, se encuentra en Luque et al. (2025), la cual muestra un buen desempeño relativo para estimar la concentración de NO₂, utilizando una configuración con cuatro dominios anidados (resoluciones de 45 km, 15 km, 3 km y 1 km en el dominio interior).

2.2 Análisis y datos utilizados

Se seleccionaron dos períodos de 2012: un mes de invierno y uno de primavera para incluir condiciones favorables y desfavorables para la contaminación atmosférica. Ambos modelos fueron aplicados considerando un inventario de emisiones de NOx y COVs de alta resolución espacial y temporal (1 km, 1 h) desarrollado para el AMBA (Venegas et al., 2011), que incluye fuentes vehiculares, operaciones de aviones en los principales aeropuertos, y actividades residencial, comercial, y de pequeñas industrias. Se evaluó el desempeño de los modelos para estimar las concentraciones horarias de NO₂ en tres estaciones de monitoreo: Parque Centenario, La Boca y Dock Sud, según las métricas FB, NMSE y FA2, siguiendo las recomendaciones de Chang y Hanna (2005). Asimismo, se analizó la sensibilidad de ambos modelos a dos parámetros clave: (i) la fracción de NO₂ emitido directamente en el total de NOx (f_{NO_2} , entre 0.10 y 0.15), y (ii) la concentración de ozono de fondo ($[O_3]_b$, entre 20-40 ppb).

3 Resultados

Ambos modelos presentan mejor rendimiento en la estación Parque Centenario, posiblemente debido a que la misma está menos influenciada por las emisiones de las centrales termoeléctricas, no consideradas en este estudio. En el periodo analizado, las métricas de desempeño obtenidas en este sitio para estimar la concentración horaria

de NO₂ son FB=-0.11, NMSE=0.17 y FA2=0.89 para el DAUMOD-GRS; mientras que para el WRF-CMAQ son FB=0.03, NMSE=0.28 y FA2=0.84 (N=1160). Ambos modelos presentan respuestas similares al cambio de parámetros, con mayores diferencias en relación al f-NO₂ que deben ser más investigadas.

Las distribuciones horizontales obtenidas con ambos modelos muestran patrones similares: mayores valores de concentración de NO₂ en zonas de mayor tráfico vehicular, con niveles considerablemente mayores durante el mes de invierno (Fig. 1). El modelo DAUMOD-GRS presenta, en promedio, valores de concentración más elevados (hasta 34 ppb) que el WRF-CMAQ (24 ppb). Dado que ambos utilizan los mismos datos de emisión, dichas diferencias podrían atribuirse a las condiciones de contorno, a las variables meteorológicas o a las formulaciones propias de cada uno. Futuros análisis de procesos contribuirán a determinarlo.

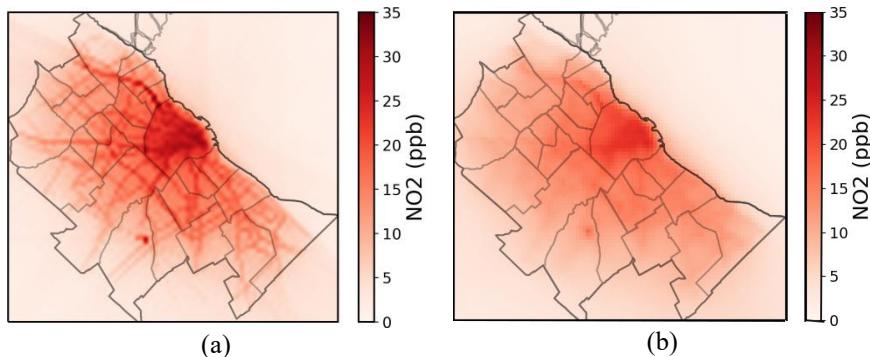


Fig. 1. NO₂ modelado con (a) DAUMOD-GRS y (b) WRF-CMAQ en el AMBA (invierno).

4 Conclusiones

Ambos modelos presentan un buen desempeño general para estimar la concentración de NO₂ en los tres sitios de monitoreo y períodos analizados, siendo mejores en la estación Parque Centenario y en el mes de invierno, cuando las condiciones atmosféricas son más favorables para la contaminación atmosférica. Los mapas de concentración de NO₂ simulados por ambos modelos presentan, en promedio, patrones de variación similares, aunque el DAUMOD-GRS produce mayores valores de concentración y gradientes horizontales más marcados que el WRF-CMAQ, consistente con diferencias en sus formulaciones, que futuros análisis de procesos buscarán confirmar. Esta comparación constituye la primera evaluación sistemática de modelos con diferentes niveles de complejidad en el AMBA, y proporciona evidencia valiosa sobre las condiciones en las que un modelo simple puede ser útil como herramienta de apoyo para estudios de calidad del aire.

Referencias

- Azzi, M., Johnson, G., Cope, M. (1992). An introduction to the generic reaction set photochemical smog model. Proc. 11th Int. Clean Air Conf, pp 451–462. Available at: <http://hdl.handle.net/102.100.100/247315?index=1>.
- Byun, D.W., Schere K.L. (2006). Review of the governing equations, computational algorithms, and other components of the models-3 community multiscale air quality (CMAQ) modelling system. *Appl Mech Rev* 59, 51-77.
- Chang, J.C., Hanna, S.R. (2005). Air quality model performance evaluation. *Meteorol Atmos Phys* 87, 167–196.
- Liu, W., Ling, X., Xue, Y., Wu, S., Gao, J., Zhao, L., He, B. (2024). Study on the concentration of top air Pollutants in Xuzhou City in Winter 2020 Based on the WRF-Chem and ADMS-Urban models. *Atmosphere* 15, 129. <https://doi.org/10.3390/atmos15010129>
- Luque, S., Pineda Rojas, A.L., Fita, L., Borge, R. (2025) Sensitivity analysis of NO₂ and O₃ concentrations modeled with WRF-CMAQ to boundary and initial conditions and first model layer height in the metropolitan area of Buenos Aires, Argentina, *Air Quality, Atmosphere and Health*, en revision.
- Mazzeo, N.A., Venegas, L.E. (1991). Air pollution model for an urban area. *Atmos Res* 26, 165–179.
- Pineda Rojas, A.L. (2014). Simple atmospheric dispersion model to estimate hourly ground-level nitrogen dioxide and ozone concentrations at urban scale. *Environ Model Softw* 59, 127–134.
- Pineda Rojas A.L., Borge R., Kropff E. (2022). Characterisation of errors in an urban scale atmospheric dispersion model through clustering of performance metrics. *Air Quality, Atmosphere & Health*, <https://doi.org/10.1007/s11869-021-01145-0>
- Pineda Rojas, A.L., Venegas, L.E. (2013). Upgrade of the DAUMOD atmospheric dispersion model to estimate urban background NO₂ concentrations. *Atmos Res* 120–121, 147–154.
- Venegas, L.E., Mazzeo, N.A., Pineda Rojas, A.L. (2011). Chapter 14: Evaluation of an emission inventory and air pollution in the metropolitan area of Buenos Aires. En: D. Popovic (ed.) *Air quality-models and applications*, Editorial In-Tech, 261–288.